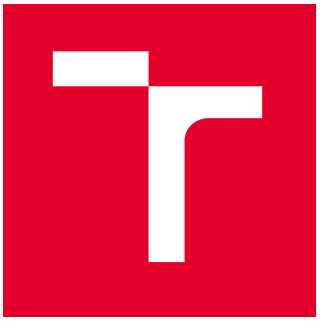


VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV FYZIKÁLNÍHO INŽENÝRSTVÍ

INSTITUTE OF PHYSICAL ENGINEERING

OPTIMALIZACE METODY RENTGENOVÉ POČÍTAČOVÉ TOMOGRAFIE PRO ZOBRAZENÍ MATERIÁLŮ S NÍZKOU HUSTOTOU

OPTIMIZATION OF X-RAY COMPUTED TOMOGRAPHY METHOD FOR IMAGING OF LOW-DENSITY MATERIALS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE — **Bc. Lukáš Maleček**

AUTHOR

VEDOUCÍ PRÁCE — **doc. Ing. Tomáš Zikmund, Ph.D.**

SUPERVISOR

BRNO 2023

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

Zadání diplomové práce

Ústav:	Ústav fyzikálního inženýrství
Student:	**Bc. Lukáš Maleček**
Studijní program:	Fyzikální inženýrství a nanotechnologie
Studijní obor:	bez specializace
Vedoucí práce:	**doc. Ing. Tomáš Zikmund, Ph.D.**
Akademický rok:	2022/23

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Optimalizace metody rentgenové počítačové tomografie pro zobrazení materiálů s nízkou hustotou

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Rentgenová počítačová tomografie je využívána pro nedestruktivní zobrazení a analýzu široké škály materiálů. Princip zobrazení je v konvenčních aplikacích založen na útlumu rentgenového záření při průchodu zkoumaným materiálem. Zobrazování materiálů s nízkou hustotou je vzhledem k nízkému rozdílu kontrastu mezi zobrazovaným materiálem a pozadím vzorku problematické. Je proto nutné využít některou z metod zvýraznění kontrastu, například využití změny fáze rentgenového záření při průchodu vzorkem. Pro optimální využití informace o změně fáze rentgenového záření je nutné pro daný vzorek nalézt specifické parametry jak pro jeho snímání v CT scanneru, tak i pro následné zpracování naměřených CT projekcí. Cílem práce je tedy vytvořit metodiku pro predikci optimálních parametrů snímání vzorků, s cílem zvýraznění vnitřní struktury materiálu pomocí režimu zobrazení ve fázovém kontrastu.

Cíle diplomové práce:

– Seznámit se s akvizicí dat v rentgenové počítačové tomografii a zaměřit se na metody akvizice vzorků s nízkou hustotou
– Navrhnout možnosti akvizice vybraných vzorků a realizovat jejich tomografické měření na přístroji Rigaku nano3DX
– Analyzovat závislost vlastností měřených vzorků na efekt fázového kontrastu.
– Vytvořit obecnou metodiku pro akvizici vzorků s nízkou hustotou a implementovat metodu phase retrieval pro zvýraznění vnitřní struktury naměřeného materiálu
– Vyhodnotit zvolené parametry pro snímání vzorků a diskutovat kvalitu realizovaných měření

Seznam doporučené literatury:

KALASOVA, Dominika, Tomas ZIKMUND, Ladislav PINA, Yoshihiro TAKEDA, Martin HORVATH, Kazuhiko OMOTE a Jozef KAISER. Characterization of a Laboratory-Based X-Ray Computed Nanotomography System for Propagation-Based Method of Phase Contrast Imaging. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement. 2020, 69(4), 1170-1178. ISSN 0018-9456. Dostupné z: doi:10.1109/TIM.2019.2910338.

PAGANIN, D., S. C. MAYO, T. E. GUREYEV, P. R. MILLER a S. W. WILKINS. Simultaneous phase and amplitude extraction from a single defocused image of a homogeneous object. Journal of Microscopy. 2002, 206(1), 33-40. ISSN 0022-2720. Dostupné z: doi:10.1046/j.1365-2818.2002.01010.x.

KAK, Avinash C. a Malcolm SLANEY. Principles of computerized tomographic imaging. 2nd edition. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001. Classics in applied mathematics. ISBN 978-0898714944.

ENDRIZZI, Marco. X-ray phase-contrast imaging. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2018, 878, 88-98. ISSN 01689002. Dostupné z: doi:10.1016/j.nima.2017.07.036.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2022/23

V Brně, dne

L. S.

prof. RNDr. Tomáš Šikola, CSc. ředitel ústavu	doc. Ing. Jiří Hlinka, Ph.D. děkan fakulty

ABSTRAKT

Rentgenová výpočetní tomografie je technika umožňující trojrozměrné nedestruktivní zobrazování vnitřních struktur měřených objektů. Tato zobrazovací metoda se stala standardním nástrojem využívaným v celé řadě oborů, včetně lékařství, průmyslu či vědy. Tradiční rentgenová výpočetní tomografie je založená na absorpci rentgenového záření při průchodu měřeným objektem. Tento konvenční způsob zobrazování má však své limity, kterých dosahuje například při měření objektů s nízkou hustotou, jež vykazují nízký útlum rentgenového záření. V těchto případech nedochází k zisku dostatečného kontrastu mezi měřeným objektem a pozadím. Diplomová práce se zabývá optimalizací zobrazování ve fázovém kontrastu, který pro překročení limitů absorpční výpočetní tomografie využívá změny ve fázi záření při průchodu vzorkem. V této práci je zaznamenání změn ve fázi dosaženo metodou volného šíření záření. Hlavním cílem je vytvoření metodiky sloužící k nalezení správných parametrů, nejen v části akvizice tomografických dat, ale i pro následné zpracování získaných rentgenových projekcí. Na dosažených výsledcích je kvalitativně i kvantitativně hodnocen přínos vytvořené metodiky.

SUMMARY

X-ray computed tomography is a technique enabling three-dimensional non-destructive imaging of the internal structure of measured objects. This imaging method has become a standard tool utilized in various fields, including medicine, industry and science. Conventional X-ray computed tomography is based on the absorption of X-rays as it is passing through the measured object. However, this conventional imaging approach has its limitations, particularly when imaging objects with low density that causes only low X-ray attenuation. In such cases, sufficient contrast between the measured object and the background is not achieved. This thesis focuses on the optimization of phase contrast imaging, which utilizes phase changes of radiation as it is passing through the sample to overcome the limitations of absorption-based computed tomography. The detection of phase changes is achieved in the thesis using the propagation-based method. The main goal is to develop a methodology for finding the optimal parameters for the acquisition of tomographic data and also for the following processing of obtained X-ray projections. The results are qualitatively and quantitatively evaluated to assess the benefits of the developed methodology.

KLÍČOVÁ SLOVA

počítačová tomografie, rentgenové záření, fázový kontrast, metoda volného šíření záření

KEYWORDS

computed tomography, X-ray, phase contrast tomography, propagation based method

MALEČEK, Lukáš. *Optimalizace metody rentgenové počítačové tomografie pro zobrazení materiálů s nízkou hustotou*. Brno: Brno University of Technology, Fakulta strojního inženýrství, Ústav fyzikálního inženýrství, 2023, 83 s. Diplomová práce. Vedoucí práce: doc. Ing. Tomáš Zikmund, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci Optimalizace metody rentgenové počítačové tomografie pro zobrazení materiálů s nízkou hustotou vypracoval samostatně pod vedením doc. Ing. Tomáše Zikmunda, Ph.D., s použitím materiálů uvedených v seznamu literatury.

Bc. Lukáš Maleček

Na tomto místě bych rád poděkoval doc. Ing. Tomáši Zikmundovi, Ph.D. za odborné vedení mé práce a jeho cenné rady. Poděkování patří i odbornému konzultantovi Ing. Jakubovi Lázňovskému za jeho pohotové a konstruktivní připomínky. Za všechny poskytnuté rady a doporučení, týkajících se přístroje Rigaku Nano3DX, děkuji Ing. Jakubovi Šalplachtovi, Ph.D. a Ing. Markovi Zemkovi. Poděkování zároveň patří celé mé rodině, za jejich ohromnou podporu během mých studií.

Bc. Lukáš Maleček

Obsah

Úvod **1**

1 Princip výpočetní tomografie **3**
1.1 Rentgenové záření a jeho vznik . . . 4
1.1.1 Brzdné záření . . . 6
1.1.2 Charakteristické záření . . . 7
1.1.3 Koherence generovaného záření . . . 9
1.2 Geometrie svazku rentgenového záření . . . 11
1.3 Interakce rentgenového záření s látkou . . . 12
1.3.1 Fotoelektrický jev . . . 12
1.3.2 Comptonův rozptyl . . . 14
1.3.3 Rayleighův rozptyl . . . 15
1.3.4 Útlum rentgenového záření . . . 16
1.4 Detekce rentgenového záření . . . 18
1.5 Rekonstrukce tomografických dat . . . 20
1.5.1 Radonova transformace . . . 20
1.5.2 Fourierův projekční teorém . . . 21
1.5.3 Filtrovaná zpětná projekce . . . 22

2 Fázový kontrast ve výpočetní tomografii **23**
2.1 Index lomu . . . 23
2.1.1 Komplexní index lomu . . . 24
2.2 Metody zobrazování ve fázovém kontrastu . . . 26
2.2.1 Rentgenová mřížková interferometrie . . . 26
2.2.2 Rentgenová krystalová interferometrie . . . 27
2.2.3 Rentgenové zobrazování pomocí analyzéru . . . 28
2.2.4 Metoda volného šíření záření a zpracování dat . . . 29

3 Experimentální část **35**
3.1 Rigaku Nano 3DX . . . 35
3.1.1 Prostorové rozlišení . . . 38
3.1.2 Průběh měření . . . 40
3.2 Parametry pro hodnocení naměřených dat . . . 41
3.3 Výběr optimální pozice pro měření vzorku . . . 44
3.3.1 Vliv přípravy vzorku na fázový kontrast . . . 55
3.4 Phase retrieval a tomografická rekonstrukce . . . 57
3.4.1 Počítačová aplikace pro výpočet koeficientů δ a β . . . 57

3.4.2 Ověření teoretického výpočtu koeficientů δ a β 60
3.5 Aplikace vytvořené metodiky 63
3.5.1 Vzorek papíru 63
3.5.2 Vzorek glukosaminové tablety 67

Závěr **71**

Literatura **73**

Seznam použitých zkratek a symbolů **81**

Úvod

V roce 1895 objevil Wilhelm Conrad Röntgen do té doby nepopsaný druh elektromagnetického záření tzv. paprsků X. Tímto objevem zahájil revoluci v oblasti rozvoje nových zobrazovacích technik, mezi které se jednoznačně řadí i metoda rentgenové počítačové tomografie. Dnes se již tato nedestruktivní technika řadí mezi standardní nástroje sloužící při zkoumání vnitřních struktur měřených objektů. Jedná se o techniku, která nachází uplatnění v celé řadě odvětví, a to zejména v lékařství, průmyslu, vědě či bezpečnostním sektoru. Z důvodu rozmanitosti oborů využívajících tuto zobrazovací techniku je i škála zkoumaných objektů velmi široká.

Tradiční metoda rentgenové počítačové tomografie je založena na detekci rentgenového záření, které prošlo měřeným objektem. Informace o vnitřní struktuře objektu se získávají díky absorpci tohoto záření, která se projevuje ve změně jeho intenzity. Trojrozměrné informace o vnitřní struktuře je dosaženo měřením objektu pod mnoha různými úhly. Bohužel tento přístup má své limity, a to zejména při zobrazování objektů s nízkým útlumem rentgenového záření. Problematické je rovněž zobrazování objektů, které jsou složeny z více materiálů s velmi podobným útlumem. V těchto případech není ve vnitřních strukturách dosaženo dostatečného kontrastu. Existují však metody, jež tyto limity dokáží překonat.

Při průchodu rentgenového záření ovšem nedochází pouze k jeho útlumu, ale rovněž ke změně jeho fáze. Je-li při zobrazování objektu přímo využito tohoto jevu, hovoříme o zobrazování ve fázovém kontrastu. Existuje několik způsobů, jak v počítačové tomografii fázového kontrastu dosáhnout. Jednou z technik, překračujících výše zmíněné limity absorpční počítačové tomografie, je i tzv. metoda volného šíření záření. Ta je založena na postupné interferenci záření rozptýleného na strukturách měřeného vzorku. Práce se zabývá optimalizací využití této metody na přístroji Rigaku Nano3DX.

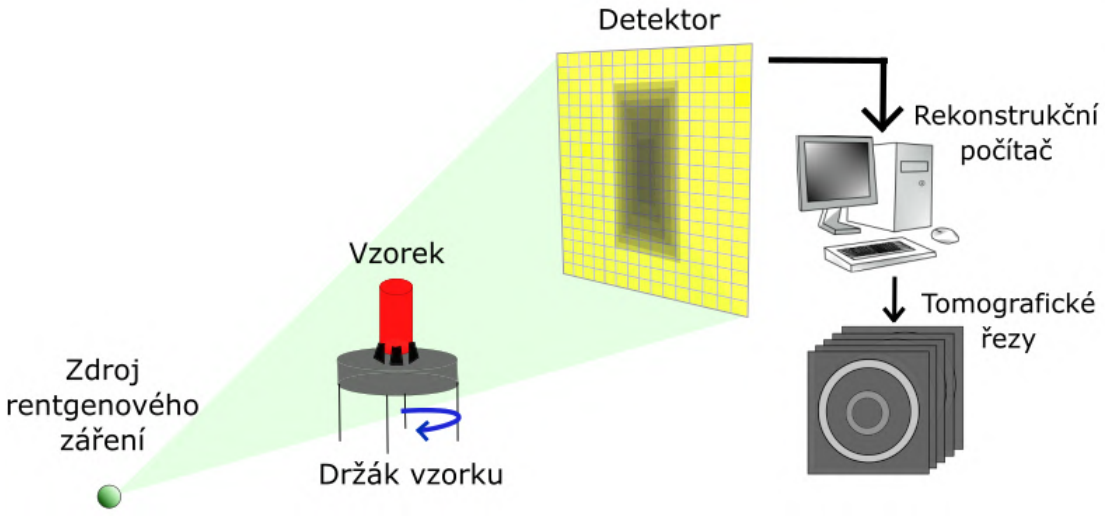
První kapitola se věnuje obecným principům využívaných v rentgenové počítačové tomografii. Je zde popsán princip nejdůležitějších komponent počítačových tomografů. Podstatná část této kapitoly je rovněž věnována fyzikálním jevům, které způsobují útlum záření. Druhá kapitola se již zaměřuje na 3D rentgenové zobrazování ve fázovém kontrastu. Jsou zde popsány čtyři nejvíce rozšířené způsoby tohoto typu zobrazování, z nichž je největší pozornost věnována metodě volného šíření záření. Poslední kapitola se věnuje experimentální části. Hlavním cílem bylo vytvoření obecné metodiky, která by umožnila optimalizovat akvizici vzorků s nízkou hustotou. Je zde rovněž zahrnuto i následné testování a prověření vytvořené metodiky.

Přínosem této práce je nalezení parametrů pro obdržení informace o vnitřní struktuře vzorků s nízkou hustotou, kterou by za použití absorpčního kontrastu nebylo možné získat. Tato optimalizovaná technika umožňuje provedení spolehlivé

analýzy objektů, jejichž zobrazování je obecně problematické. Mohla by tak nalézt uplatnění v různých průmyslových odvětvích, včetně farmacie či výroby syntetických materiálů, kde se často s materiály s nízkou hustotou setkáváme.

1 Princip výpočetní tomografie

Rentgenová výpočetní tomografie, známá také pod zkratkou X-ray CT (angl. „X-ray computed tomography“), je nedestruktivní metoda sloužící k 3D zobrazení vnitřních struktur měřených objektů. Tato metoda je velice využívána ve zdravotnictví, vědě i průmyslu. Ačkoliv se konfigurace dle oblasti využití tomografických přístrojů liší, jejich princip je stejný. Metoda je založena na detekci rentgenového záření, které prochází zkoumaným objektem. Ve zdravotnictví je měřeným objektem pacient. Rentgenový zdroj a detektor se okolo něj synchronně otáčí [1, 2]. Hlavním požadavkem u těchto přístrojů jsou co nejnižší radiační zásah pacienta a dosažení dostatečného prostorové rozlišení v nejkratším možném čase. Tyto faktory pak vytvářejí jisté limity v akvizici dat zdravotnických přístrojů [3]. V průmyslovém využití se nejčastěji, na rozdíl od lékařských přístrojů, využívá stabilního rentgenového zdroje a detektoru, mezi kterými je v rotačním držáku umístěn vzorek. Hlavním požadavkem je dostatečná kvalita dat v nejkratším možném čase. Ve vědeckém využití je konfigurace přístroje většinou velice podobná jako v průmyslu, ovšem zcela zásadním faktorem je dosažená kvalita dat. Výsledkem skenování jsou tomografická data, která standardně nazýváme 2D CT projekcemi. Ty jsou ukládány do rekonstrukčního počítače, ve kterém projekce rekonstruujeme pro vznik tomografických řezů. Princip této metody je schématicky znázorněn na obrázku 1.1. V této kapitole budou podrobněji popsány procesy, ke kterým během akvizice absorpčních tomografických řezů dochází.



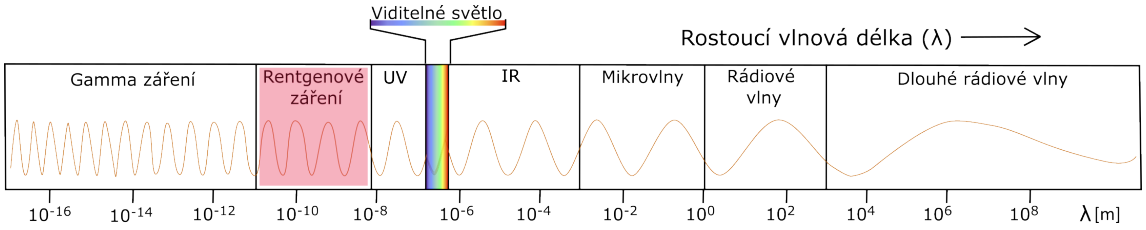
Obr. 1.1: Princip průmyslové výpočetní tomografie: Rentgenové záření, generované v jeho zdroji, prostupuje otáčejícím se vzorkem a je jím absorbováno. Zachycením prošlého rentgenového záření vznikají 2D projekce. Ty jsou v počítači rekonstruovány a vytvářejí 3D tomografická data, složena z 2D řezů.

1.1 Rentgenové záření a jeho vznik

Rentgenové záření můžeme popsat jako postupné vlnění elektrického a na něj kolmého magnetického pole. Jedná se tedy o jeden z druhů elektromagnetického záření, která se v běžném životě vyskytují všude kolem nás, a to například v podobě ultrafialového záření, infračerveného záření, nebo viditelného světla. Ovšem na základě konceptu vlnově částicového dualismu, jenž byl definován Albertem Einsteinem v roce 1905, můžeme rentgenové záření rovněž popsat jako proud fotonů se specifickou energií. Tuto energii jsme schopni vypočítat na základě následujícího vztahu [1, 4]:

$$E = \frac{hc}{\lambda}, \tag{1.1}$$

kde h je Planckova konstanta ($6,63 \times 10^{-34}$ J·s), c označuje rychlost světla ve vakuu (3×10^8 m/s) a λ značí vlnovou délku záření [1]. Pro oblast rentgenového záření se vlnové délky nacházejí v rozmezí od desítek nanometrů po jednotky pikometrů ($10^{-12} - 10^{-8}$ m). Na obrázku 1.2 je znázorněna celá škála elektromagnetického záření.



Obr. 1.2: Spektrum elektromagnetického záření, kde zkratka UV reprezentuje ultrafialové záření a zkratka IR představuje infračervené záření.

Způsobů, kterými lze produkovat rentgenové záření, je několik. Jedním z nich je rentgenová trubice (rentgenka). Schéma rentgenky je znázorněno na obrázku 1.3. Hlavními součástmi každé rentgenky jsou katoda, na kterou je přiveden záporný potenciál a anoda, jež je nabita kladně.

Katodou bývá nejčastěji wolframové vlákno, ve kterém dochází ke žhavení. Tím se postupně zvyšuje kinetická energie elektronů až k hranici vazební energie (výstupní práce). Jakmile dojde k překročení této energie, může nastat tzv. termoemise elektronů. Proudovou hustotu elektronů, které katodu opouštějí, popisuje Richardsonův-Dushmanův vztah [5, 6]:

$$J = AT^2 e^{-W/kT}, \tag{1.2}$$

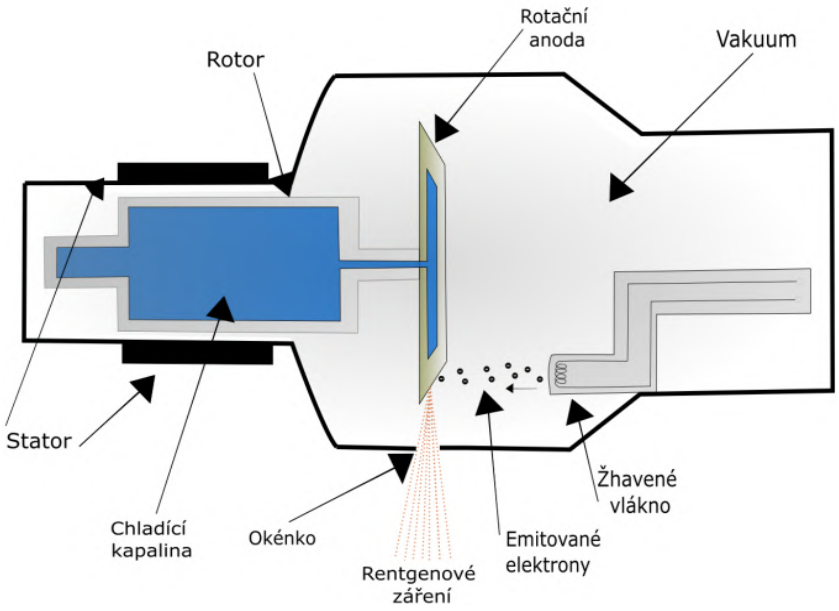
$$A = \frac{4\pi m k^2 q}{h^3}, \tag{1.3}$$

kde T je teplota vlákna, W značí výstupní práci materiálu, k Boltzmanovu konstantu a m, q jsou hmotnost a náboj elektronu [5, 7]. Výsledný elektronový proud, jenž získáme dosazením do vztahu 1.2 je teoretickým maximem, které je ovšem v reálných experimentech nedosažitelné. Skutečná hodnota elektronového proudu je však kvůli ztrátám vždy nižší, než toto teoretické maximum.

Elektrony emitované katodou jsou elektrickým polem nasměrovány a urychlovány k anodě. Při dopadu těchto vysokorychlostních elektronů na anodu dochází k různým typům srážek, při kterých vzniká rentgenové záření nebo dochází k tepelným ztrátám. Ztráty typického rentgenového zdroje jsou velmi vysoké, jelikož 99 % energie, která je systému dodána, se přemění na teplo. Kvůli takto intenzivnímu zahřívání musí být anoda rentgenky velmi dobře chlazena. V případě výkonných rentgenových zdrojů se nejčastěji používají rotační anody. Ohnisková stopa elektronů (dále pouze FS z angl. „focal spot“) je tak rovnoměrně rozloženo po celém obvodu anody a dochází k většímu odvodu tepla. Konstrukce rotační anody je často doplněna i o aktivní chlazení v podobě chladícího média [1, 5].

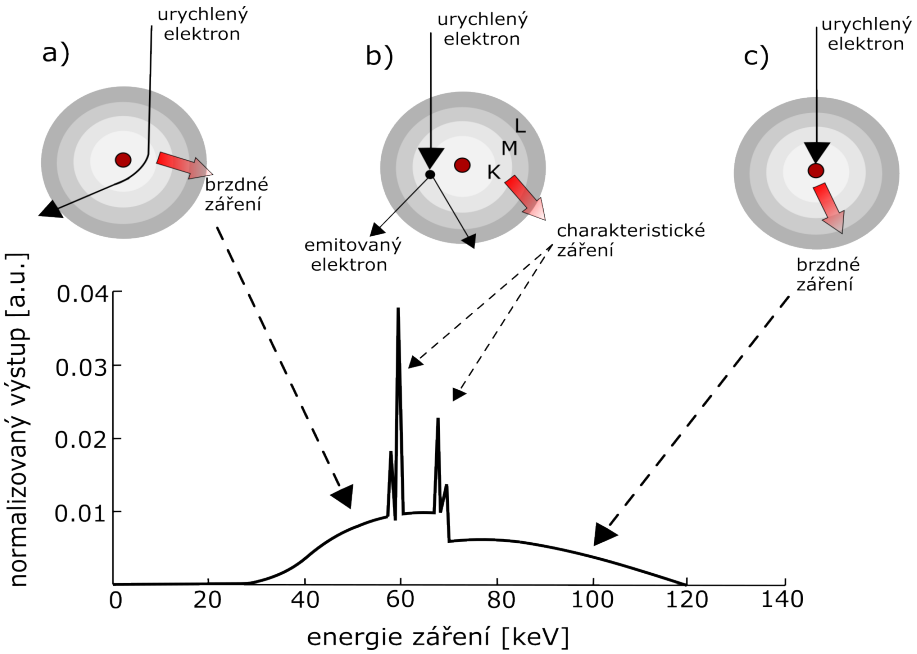
Obě tyto hlavní komponenty jsou pro správné fungování rentgenky umístěny ve vakuu. Bez přítomnosti vakua v rentgenové trubici by docházelo k rozptylu elektronů již na molekulách vzduchu. Elektronový svazek by tedy nebylo možné fokusovat do FS a rapidně by se snížila i hodnota elektronového toku.

Vzniklé rentgenové záření opouští rentgenku skrze tzv. okénko. To musí být dostatečně pevné, aby dokázalo udržet vakuum uvnitř rentgenky a zároveň musí co nejméně ovlivňovat procházející rentgenové záření (vysoká propustnost). Z těchto důvodů se nejčastěji využívá berylium.



Obr. 1.3: Zjednodušené schéma rentgenky s rotační anodou.

Výsledné rentgenové záření, které je rentgenkou produkováno je ovlivněno hned několika faktory. Mezi ty nejzásadnější se řadí materiál, ze kterého je anoda vyrobena, urychlovací napětí mezi katodou a anodou, proud rentgenky a úhel anody, určující plochu FS [2]. Typické spektrum rentgenového záření je znázorněno na obrázku 1.4. Z tohoto obrázku je patrné, že rentgenové záření je tvořeno spojitou složkou brzdného záření a několika ostrými peaky (charakteristické záření). V následujících podkapitolách budou tyto složky, společně s jevy, při kterých vznikají, podrobněji popsány.



Obr. 1.4: Spektrum rentgenového záření, tvořené spojitou brzdnou složkou a charakteristickými peaky. V horní části tohoto obrázku jsou znázorněny interakce urychlených elektronů s anodou. a) Prudkou změnou vektoru rychlosti dojde k vyzáření fotonu brzdného záření. b) Vznik charakteristických peaků interakcí urychleného elektronu s elektronem ve vnitřních slupkách materiálu anody. c) Vznik brzdného záření interakcí urychleného elektronu s jádrem. [1, 7].

1.1.1 Brzdné záření

Již název této složky rentgenového záření napovídá, že jeho vznik bude úzce spojený se změnou vektoru rychlosti. Často toto záření můžeme najít v literatuře pod německým názvem *bremsstrahlung*. Na obrázku 1.4, konkrétně na interakcích a) a c), je znázorněno, při kterých situacích tato složka rentgenového záření vzniká [8].

Jakmile urychlené elektrony proniknou do materiálu anody, dochází okamžitě ke srážkám s jednotlivými atomy. V případě, kdy se záporně nabitý elektron nachází

v blízkosti kladně nabitého jádra, dochází vlivem Coulombických sil k prudké deakceleraci a změně jeho směru. Touto prudkou změnou rychlosti dojde ke ztrátě části jeho kinetické energie, která je vyzářena ve formě fotonu rentgenového záření. Míra vychýlení a zpomalení elektronu je nepřímo úměrná vzdálenosti urychleného fotonu od jádra. To je zároveň důvodem spojitého profilu brzdného záření [1, 8].

Druhým typem srážky, při které vzniká tento typ záření, je přímá srážka s jádrem jednoho z atomů materiálu anody. Při této srážce je veškerá kinetická energie původnímu fotonu vyzářena ve formě rentgenového záření. Největší hodnota energie ve spektru rentgenového záření tedy odpovídá urychlovacímu napětí mezi anodou a katodou. Při pohledu na obrázek 1.4 je tedy patrné, že pro generování rentgenového záření bylo použito urychlovací napětí 120 kV [1, 8].

Celkové množství fotonů brzdného rentgenového záření se řídí následujícím vztahem:

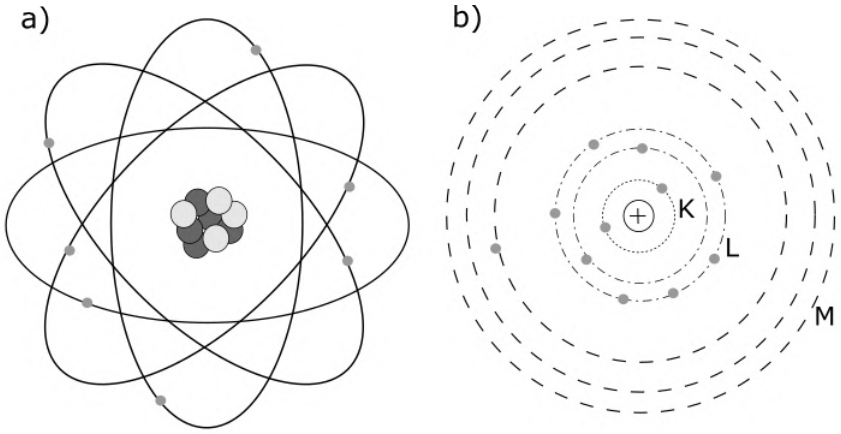
$$I \sim \frac{Z^2 N^4 e^6}{m^2}, \tag{1.4}$$

kde Z označuje protonové číslo materiálu anody, N počet elektronů dopadajících na anodu, e náboj elektronu a m hmotnost elektronu [1]. Z rovnice 1.4 je patrné, že pravděpodobnost vzniku fotonu rentgenového záření rapidně stoupá s rostoucím protonovým číslem anody. Dalším parametrem, který velice ovlivňuje rentgenovou produkci, je množství elektronů dopadajících na anodu. V praxi se tato hodnota dá ovlivnit změnou proudu rentgenky, jelikož mezi počtem elektronů a proudem rentgenky platí přímá úměra.

1.1.2 Charakteristické záření

Vznik charakteristické složky rentgenového záření je znázorněn na obrázku 1.4, konkrétně při interakci b). Z tohoto obrázku je patrné, že se jedná o interakci urychleného elektronu s elektrony, které se nacházejí ve vnitřních slupkách jednotlivých atomů materiálu anody [1]. Pro bližší popis vzniku charakteristického záření zde bude nejprve objasněn model atomu.

Prvním, kdo na základě kvantové teorie popsal model atomu, byl dánský vědec Niels Bohr [9]. Jeho model atomu obsahuje ve středu kladně nabité jádro, okolo něhož se na kruhových slupkách nacházejí záporně nabité elektrony. Tento model byl v roce 1916 doplněn Arnoldem Sommerfeldem, v jehož teorii nebyly jednotlivé vrstvy pouze kruhové, ale též eliptické [2, 9]. Elektrony uspořádané na jednotlivých vrstvách jsou popsány pomocí čtyř kvantových čísel (hlavní, vedlejší, magnetické a spinové). Jejich uspořádání se řídí Pauliho vylučovacím principem, tedy na jedné slupce se nemohou vyskytovat dva elektrony se stejnými kvantovými čísly. Orbitaly, na kterých se elektrony nacházejí, se standardně označují postupně K, L, M, atd. ve směru od jádra, tak jak je znázorněno na obrázku 1.5 [9].



Obr. 1.5: Bohrův-Sommerfeldův (BS) model atomu. a) Prostorový model atomu, v němž se nachází kombinace sférických a eliptických orbitalů s elektrony. b) Zjednodušený BS model, ve kterém jsou vyznačeny jednotlivé slupky K, L, M [9].

V případě, že urychlený elektron pronikne do vnitřních slupek atomu materiálu anody, může nastat srážka s elektronem nacházejícím se na jedné z nich. Jestliže je kinetická energie urychleného atomu dostatečná, dojde k vyražení elektronu z orbitalu a na jeho místě vznikne prázdné (vakantní) místo. V takovém stavu atom není schopen trvale setrvat a dochází k deexcitaci elektronu z vyššího orbitalu. Deexcitovaný elektron tedy zaplní vakantní místo. Při přechodu dochází k vyzáření fotonu, který má přesně definovanou energii (plynoucí ze zákona zachování energie). Energie tohoto fotonu je rovna rozdílu energií jednotlivých energetických hladin, mezi kterými přechod nastal. Tyto rozdíly energetických hladin jsou pro každý materiál různé. Z tohoto důvodu označujeme záření charakteristické [1, 9].

Na obrázku 1.4 je toto záření představováno diskrétní částí spektra, jež se projevuje ve formě ostrých peaků. Na základě jejich pozice jsme schopni přesně určit materiál anody, na němž rentgenové záření vzniklo. Jednotlivé peaky jsou označovány na základě přechodů, při kterých vznikají. První písmeno v tomto označení vyjadřuje, na jakou hladinu elektron deexcitoval, řeckými písmeny se značí, ze které slupky elektron deexcitoval. Například přechod ze slupky L na slupku K by se na základě této konvence označil jako K_α [9]. S vyšší energií charakteristického záření roste také jeho schopnost prostupovat materiálem vzorku. Výběr materiálu anody je tedy pro tomografické měření naprosto zásadní. Se zvyšujícím se protonovým číslem materiálu se zvyšuje i energie nejpronikavějšího charakteristického záření. Zatímco v případě železné anody ($Z = 26$) by energie nejpronikavějších fotonů byla 7,125 keV, tak pro případ wolframové anody ($Z = 74$) je tato hodnota 69,533 keV [10].

1.1.3 Koherence generovaného záření

Jedním z parametrů, kterým lze kvalitu a vlastnosti zdrojů elektromagnetického záření vyjádřit je také koherence záření, které zdroj generuje [11]. Koherence popisuje vzájemnou korelaci jednotlivých fyzikálních vlastností záření (frekvence, fáze, amplituda) [12]. Koherentní záření se vyznačuje jeho schopností vzájemné interference [13, 14]. Nejlepšími zdroji jsou z tohoto hlediska lasery, jejichž princip je založen na stimulované emisi. Záření, které produkují, je vysoce koherentní. Na druhou stranu, rentgenky se řadí do skupiny zdrojů, jež jsou založeny na spontánní emisi záření. Generované záření těchto zdrojů již takto vysoce koherentní zpravidla nebývá [11, 15]. Důvodem je velký počet atomů, které nezávisle na sobě vyzařují fotony s rozdílnými frekvencemi a fázemi [13].

Tyto náhodné světelné fluktuace jsou předmětem teorie optické koherence. Na základě této teorie rozdělujeme světlo na koherentní, nekoherentní, nebo částečně koherentní. Koherenci poté podrobněji popisujeme z časového a prostorového hlediska [13, 16]. Abychom však mohli podrobněji popsat koherenci záření z těchto hledisek, zavedeme si nejdříve pojem intenzity světla.

Světlo, jakožto elektromagnetické vlnění, popíšeme jako komplexní vlnovou funkci $\psi(\vec{r}, t)$, závislou na polohovém vektoru $\vec{r}$ a času t. Intenzitu $I(\vec{r}, t)$ tohoto světla lze vyjádřit jako střední hodnotu kvadrátu absolutní hodnoty komplexní vlnové funkce $\psi(\vec{r}, t)$, tedy

$$I(\vec{r}, t) = \left\langle \left|\psi(\vec{r}, t)\right|^2 \right\rangle, \tag{1.5}$$

kde $\left|\psi(\vec{r}, t)\right|^2$ nazýváme okamžitou intenzitou [13, 14]. Hodnota okamžité intenzity je obecně proměnná v čase. V případě, že je střední hodnota intenzity konstantní, nazýváme světlo jako statisticky stacionární. Pro takovou vlnu můžeme operaci statistického středování nahradit časovým středováním přes dlouhý časový úsek. Rovnice 1.6 tak přejde do tvaru

$$I(\vec{r}) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} \left|\psi(\vec{r}, t)\right|^2 dt, \tag{1.6}$$

kde intervalem $\langle -T, T\rangle$ označujeme časový úsek [13].

Časová koherence

Časová koherence záření slouží k popisu stavů světelné vlny ve dvou různých časech. Pro bližší popis se tedy zaměříme na fluktuace statisticky stacionárního světla v jednom pevném bodě prostoru. Míru časové koherence záření můžeme vyjádřit pomocí komplexního stupně časové koherence $g(\tau)$, jenž vypočítáme následujícím

vztahem 1.8:

$$g(\tau) = \frac{\langle \Psi^*(t)\Psi(t+\tau)\rangle}{\langle \Psi^*(t)\Psi(t)\rangle}, \tag{1.7}$$

kde τ označuje krátké časové posunutí a symbolem * označujeme komplexní sdružení funkce [13]. Jedná se o normovanou veličinu, jejíž hodnoty leží v intervalu $\langle 0, 1\rangle$. Pro $|g(\tau)| = 1$ je vlna úplně časově koherentní, pro $|g(\tau)| \in (0, 1)$ hovoříme o částečné koherenci. Jestliže je $|g(\tau)| = 0$, jedná se o světlo úplně nekoherentní.

Pro případ částečně koherentního světla definujeme tzv. koherenční dobu τ_c, během které klesne hodnota komplexního stupně časové koherence na specifickou hodnotu. Koherenční dobu vyjadřujeme vztahem:

$$\tau_c = \int_{-\infty}^{\infty} |g(\tau)|^2 \, d\tau. \tag{1.8}$$

Jestliže je koherenční doba τ_c mnohem delší, než je doba potřebná k průchodu zkoumaným vzorkem, je vzhledem k systému světlo efektivně úplně koherentní [13]. Pro monochromatické světlo je koherenční doba nekonečně dlouhá. Na základě znalosti koherenční doby jsme rovněž schopni určit tzv. koherenční délku [13]:

$$l_c = c \cdot \tau_c. \tag{1.9}$$

Prostorová koherence

Prostorová koherence slouží k popisu vzájemné korelace záření ve dvou rozdílných bodech prostoru r_1 a r_2. Limitní případ poté nastává pro $r_1 = r_2$, ve které prostorová koherence přechází v časovou. Míru prostorové koherence vyjadřujeme pomocí vztahu 1.10, který nazýváme parametrem komplexního stupně koherence [13, 14]

$$g(r_1, r_2, \tau) = \frac{\langle \Psi^*(r_1, t)\Psi(r_2, t+\tau)\rangle}{[I(r_1)I(r_2)]^{1/2}}, \tag{1.10}$$

kde $I(r_1)$ a $I(r_2)$ označují intenzity záření v bodech r_1 a r_2. Absolutní hodnota komplexního stupně koherence může, stejně jako komplexní stupeň časové koherence, nabývat $0 \leq |g(r_1, r_2, \tau)| \leq 1$. Vyjadřujeme tedy tímto vztahem korelaci mezi fluktuacemi v bodě r_1 a fluktuacemi v bodě r_2, které jsou od sebe zpožděny o τ [13, 14]. Jestliže hodnoty fází záření jsou chaotické a fázory fluktuují nezávisle na sobě, mluvíme o nekoherentním záření a $|g(r_1, r_2, \tau)| = 0$.

Předpokládejme, že záření vychází ze zdroje s úhlovou velikostí ϕ a je složené z nezávislých rovinných vln. V takové situaci jsme schopni přibližně určit druhý parametr charakterizující prostorovou koherenci, a sice koherenční vzdálenost [13, 14]:

$$l \approx \frac{\lambda}{\phi}. \tag{1.11}$$

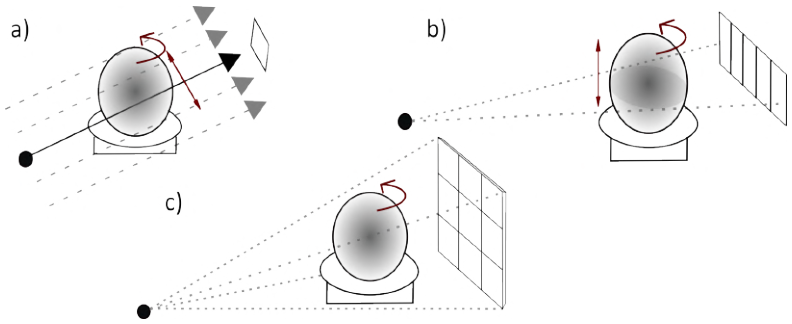
1.2 Geometrie svazku rentgenového záření

Tato sekce pojednává o typech geometrie svazků rentgenového záření, které jsou k tomografickým měřením využívány. Dělíme je obecně na tři typy: paralelní svazek (z angl. „parallel beam“), vějířovitý svazek (z angl. „fan beam“) a kuželovitý svazek (z angl. „cone beam“). Všechny tyto typy jsou ilustrovány pomocí obrázku 1.6.

V tzv. první generaci CT přístrojů bylo využíváno paralelního svazku rentgenového záření v kombinaci s detektorem o jednom pixelu (viz obrázek 1.6 a)). Akvizice tomografických dat byla prováděna pomocí postupného posouvání vzorkem, což bylo časově velice náročné [9]. Proto se paralelní typ akvizice v této konfiguraci již nevyužívá. V moderních CT přístrojích je využíváno paralelního svazku záření v kombinaci s plošným detektorem, který zachycuje i miliony pixelů najednou. Kompletní informace o vzorku je dosažena akvizicí rentgenových projekcí z úhlového intervalu 0–180° [9].

Druhým typem geometrie je vějířovitý tvar rentgenového svazku (viz obrázek 1.6 b)). Při získávání projekcí je měřena celá rovina vzorku, tudíž je krom rotace s měřeným objektem posouváno pouze ve vertikálním směru [17]. Tato geometrie přinesla v porovnání s první generací CT velké urychlení měřících časů. Geometrie vějířovitého svazku záření nachází největší uplatnění v lékařských CT systémech [9]. Pro zaznamenání tohoto typu geometrie jsou nejčastěji využívány lineární typy detektorů, o nichž budeme blíže diskutovat v sekci č. 1.4. [18].

V průmyslové výpočetní tomografii je nejčastějším typem geometrie rentgenového svazku kuželovitý svazek. U tohoto typu není potřebná žádná kolimace svazku. Pro detekci kuželovitého svazku je využíváno plošných detektorů, což umožňuje rychlé akviziční časy [18]. Při použití kuželovitého svazku dochází ke geometrickému zvětšení pořízeného obrazu. Pro zisk kompletní informace o měřeném objektu je nutná akvizice rentgenových projekcí v úhlovém rozsahu 0–360° [9].



Obr. 1.6: Geometrie svazku rentgenového záření používané v rentgenové počítačové tomografii, kde a) je paralelní svazek, b) je vějířovitý svazek a c) je kuželovitý svazek.

1.3 Interakce rentgenového záření s látkou

V předchozích sekcích byl popsán vznik a základní charakteristika rentgenového záření (RTG). RTG má velmi široké uplatnění v oblasti vědy, lékařství i průmyslu, a to zejména kvůli jeho schopnosti pronikat skrze materiály a díky následné detekci získávat informace o vnitřní struktuře [9].

Průchodem RTG skrze prozařovaný objekt je jeho původní intenzita I_0, vycházející ze zdroje RTG, postupně utlumována materiálem prozařovaného objektu [5]. V dopadajícím svazku se ovšem nemění jen počet fotonů (celkovou intenzitu), ale i jeho původní směr (rozptyl záření). Celý tento proces, jenž je naprosto esenciální pro metodu absorpční počítačové tomografie, se nazývá útlum rentgenového záření [5]. Dochází k němu zejména kvůli těmto čtyřem fyzikálním jevům: fotoelektrickému jevu, Comptonově rozptylu, Rayleighovu rozptylu a tvorbě páru elektron-pozitron. Pravděpodobnost výskytu těchto jevů se mění zejména na základě energie dopadajícího svazku záření [18].

Standardní laboratorní tomografická zařízení využívají rentgenové záření o energiích 1–300 keV. Energeticky nejnáročnějším je z vyjmenovaných jevů vznik páru elektron-pozitron. K jeho výskytu by energie dopadajícího svazku musela dosahovat alespoň jednotek MeV, což je řádově vyšší hodnota, než je v laboratorních CT přístrojích používána [9]. To je důvod, proč zde nebude tento fyzikální proces blíže popsán.

1.3.1 Fotoelektrický jev

Fotoelektrický jev byl poprvé pozorován Heinrichem Hertzem na konci 19. století, tedy ještě před zrodem kvantové teorie [19]. To je důvodem, proč se mu experimentálně naměřené výsledky nedařily fyzikálně vysvětlit. Se správným popisem tohoto jevu přišel poprvé až Albert Einstein v roce 1905. Výrazně tak přispěl k rozvoji vznikající kvantové fyziky. Za vysvětlení fotoelektrického jevu obdržel v roce 1921 i Nobelovu cenu za fyziku [19].

Fotoelektrický jev popisuje situaci, ve které mají fotony záření dopadajícího na určitý materiál větší energii, než je vazebná energie elektronu nacházejícího se ve vnitřních slupkách atomu ozařovaného materiálu [1]. V tomto případě předá dopadající foton svoji energii elektronu a uvolní tak jeho vazbu s atomem. Dopadající foton při této interakci zcela zaniká [18]. Část jeho energie je spotřebována na uvolnění vazby a zbytek je dodán uvolněnému elektronu ve formě kinetické energie. Tímto způsobem je uvolněný elektron v literatuře často nazýván fotoelektronem [1]. Celý proces můžeme popsat následujícím vztahem

$$E_k = E_i - E_b, \tag{1.12}$$

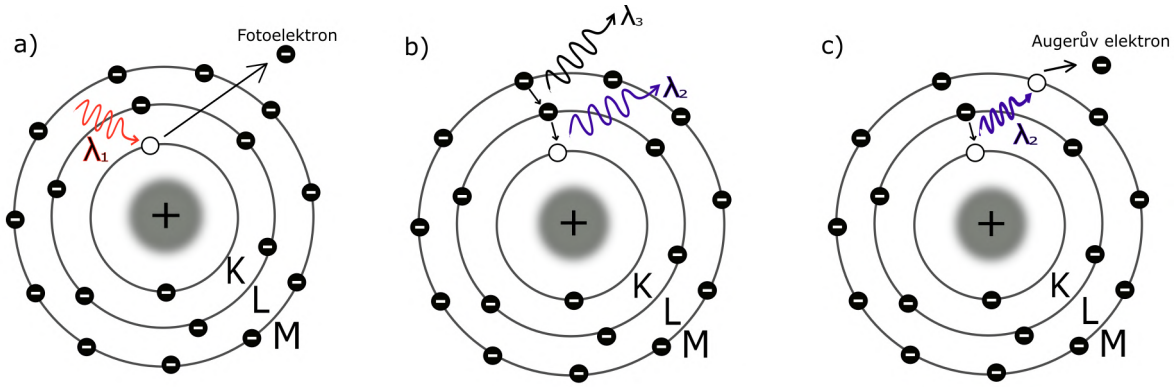
kde E_k označuje kinetickou energii fotoelektronu, E_i energii fotonu dopadajícího záření a E_b vazební energii elektronu nacházejícího se ve vnitřních slupkách atomu ozařovaného materiálu [1].

Poté, co je elektron uvolněn, vznikne v místě jeho výskytu díra. Tento stav je však z pohledu atomu energeticky nevýhodný. Aby se atom dostal do nejnižšího energetického stavu, je vakantní místo zaplněno elektronem z vyšších slupek. Při tomto jevu je vyzářeno charakteristické záření o vlnové délce, která je rovna rozdílu mezi energiemi jednotlivých slupek [9]. V případě, že má vzniklé záření vyšší energii, než je vazebná energie některého z dalších elektronů, může se celý jev opakovat a dojít tak k vyzáření dalšího elektronu. Jestliže je elektron vyzářen tímto způsobem, nazýváme jej Augerovým elektronem [5]. Schématické znázornění popsaného jevu je na obrázku 1.7.

Pravděpodobnost, že tento způsob útlumu rentgenového záření nastane, je nepřímo závislá na třetí mocnině energie dopadajícího záření a přímo úměrná čtvrté mocnině protonového čísla ozařovaného materiálu. Tuto závislost můžeme explicitně vyjádřit následujícím vztahem

$$\mu_{pe} \propto \frac{Z^4}{E^3}, \tag{1.13}$$

kde μ_{pe} vyjadřuje útlum záření, Z protonové číslo materiálu a E energii dopadajícího záření [2, 5].



Obr. 1.7: Schématické znázornění fotoelektrického jevu, pro který vždy platí nerovnost $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$. a) Vysoce energetický foton interagující s elektronem ve vnitřních slupkách atomu. b) Zaplnění díry elektronem z vyšší energetické slupky za současného vzniku charakteristického záření. c) Vyzáření Augerova elektronu.

1.3.2 Comptonův rozptyl

Druhým jevem, jenž přispívá k celkovému útlumu rentgenového záření při průchodu látkou je Comptonův rozptyl. Tento fyzikální proces byl rovněž jevem, jehož popsáním byl ovlivněn rozvoj vznikající teorie kvantové fyziky. Je pojmenován po americkém fyzikovi Arthuru Holly Comptonovi, který za jeho experimentální objevení získal v roce 1927 Nobelovu cenu za fyziku [18].

K tomuto jevu dochází v případě, že fotony dopadajícího záření mají mnohem větší energii než je vazebná energie elektronů nacházejících se v atomech ozařovaného materiálu [1]. Při splnění této podmínky dochází k interakci fotonu rentgenového záření s valenčními elektrony atomu. Na rozdíl od fotoelektrického jevu zde dochází k nepružné srážce mezi fotonem a elektronem. Elektron je z atomu uvolněn, nicméně dopadající foton mu nepředá veškerou svoji energii. Tento proces je schématicky znázorněn na obrázku 1.8.

Kdybychom uvažovali nepružnou srážku fotonu s volným elektronem, byla by celková energie původního fotonu rozdělena mezi energii vyraženého elektronu a energii rozptýleného fotonu [20]. V případě interakce s valenčním elektronem by měla do vztahu popisujícího tento jev vstupovat i vazebná energie valenčního elektronu. Ta je však v porovnání s energií původního fotonu zanedbatelná [2]. Po této aproximaci můžeme jev popsat následujícím vztahem

$$E_i = E_{sc} + E_{e^-}, \tag{1.14}$$

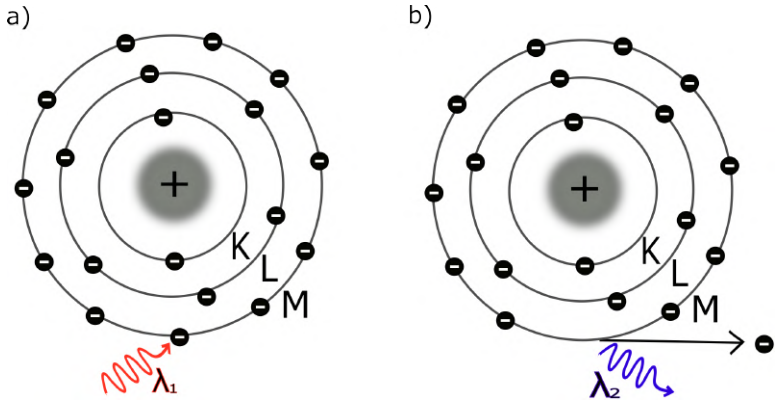
kde E_i vyjadřuje energii původního dopadajícího fotonu, E_{sc} označuje energii rozptýleného fotonu a E_{e^-} energii valenčního elektronu, jenž byl z atomu uvolněn. Rozptýlený foton může po nepružné srážce okamžitě opustit látku, nebo s látkou dále interagovat. Jelikož už nemá tak vysokou energii, probíhají opakované interakce standardně pouze v podobě fotoelektrického jevu, či Rayleighova rozptylu [2].

Směr rozptýleného fotonu může být libovolný v rozmezí 0–180°. Obecně však platí, že pro fotony s delší vlnovou délkou je preferovaný směr rozptylu v rozmezí 90–180°. Takto rozptýlené fotony jsou často označovány jako zpětně odražené fotony. Pro dopadající fotony, jejichž vlnová délka je velmi krátká, je většinou úhel rozptylu menší než 90° [1].

Pravděpodobnost, že tento jev nastane se zvyšuje se zvyšující se energií dopadajícího záření. Na rozdíl od fotoelektrického jevu nezávisí Comptonův rozptyl na protonovém čísle materiálu, ve kterém dochází k jeho výskytu, ale na jeho elektronové hustotě [5]. Útlum rentgenového záření způsobený Comptonovým rozptylem tak může být vyjádřen následujícím vztahem:

$$\mu_{compt} = \rho_e \cdot \sigma_{compt}, \tag{1.15}$$

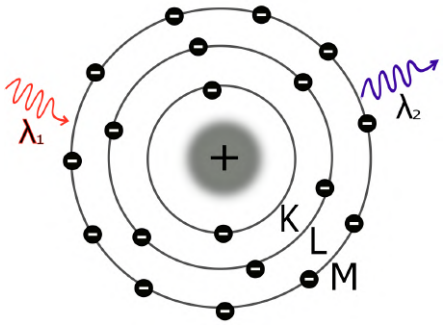
kde μ_{compt} vyjadřuje útlum záření způsobený comptonovým rozptylem, ρ_e je elektronová hustota daného materiálu a σ_{compt} označuje průřez pro Comptonův rozptyl (angl. „cross section for Compton scattering“) [5].



Obr. 1.8: a) Schématické znázornění Comptonova rozptylu, při kterém dochází k interakci mezi valenčním elektronem a dopadajícím fotonem (λ_1), jehož energie je mnohem vyšší než vazebná energie elektronu. b) Valenční elektron je uvolněn z atomu a dojde ke vzniku rozptýleného fotonu (λ_2), pro který platí (λ_2) > (λ_1).

1.3.3 Rayleighův rozptyl

Posledním typem interakce rentgenového záření s prozařovanou látkou, který je v této sekci popsán, je Rayleighův rozptyl. V tomto případě se jedná o pružnou srážku mezi fotonem rentgenového záření a celým atomem látky. Na rozdíl od předchozích dvou interakcí tak nedochází k ionizaci atomu ani předávce energie [5].



Obr. 1.9: Znázornění Rayleighova rozptylu, při kterém dopadající foton rozkmitá elektronový obal atomu, což vybudí foton o stejné energii letící v jiném směru.

K tomuto typu rozptylu dochází v případě, že dopadající rentgenové záření má malou energii. Při interakci takto nízkoenergetického fotonu s atomem dochází k

rozvibrování celého elektronového obalu atomu. Rozkmitané elektrony v elektronovém obalu zapříčiní vyzáření fotonu, jenž má naprosto stejnou vlnovou délku (λ_2), jako byla vlnové délka dopadajícího fotonu (λ_1). Dojde pouze ke změně směru šíření (viz obr. 1.9). Výchylky bývají při tomto rozptylu malé, tudíž celkový útlum, který je zapříčiněn tímto rozptylem je rovněž relativně malý[5].

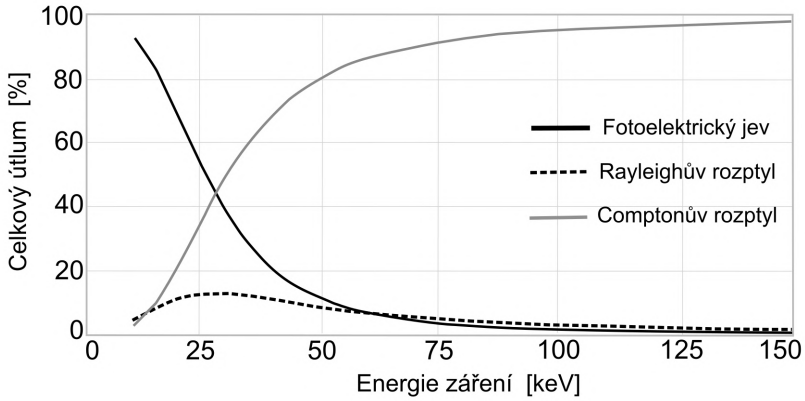
1.3.4 Útlum rentgenového záření

Relativně podrobně byly popsány principy, kterými rentgenové záření interaguje s prozařovaným materiálem. Ačkoliv jsou popsané fyzikální jevy vzájemně odlišné, dohromady přispívají k celkovému útlumu počáteční intenzity rentgenového záření a podávají tak informace o vnitřní struktuře měřených látek. V případě, že tyto dílčí příspěvky útlumu sečteme (viz rovnice 1.16), získáme hodnotu celkového útlumu původního záření

$$\mu = \mu_{pe} + \mu_{compt} + \mu_{ray}, \tag{1.16}$$

kde μ_{ray} označuje útlum způsobený Rayleighovým rozptylem [5].

Hodnota celkového útlumu tedy vyjadřuje množství absorbovaného nebo rozptýleného záření a je materiálově závislá. Ilustrace toho, jak je každá z jednotlivých interakcí zastoupena například v případě měkkých tkání, je znázorněna na obrázku 1.10. Ačkoliv obrázek popisuje útlum rentgenového záření ve vodě, můžeme prohlásit, že pouze s minimálními odchylkami budou křivky velmi podobné v případě všech biologických vzorků a obecně vzorků s nízkou hustotou [1].



Obr. 1.10: Graf znázorňující procentuální zastoupení jednotlivých interakcí při průchodu vodou v závislosti na energii prostupujícího záření [1].

Pro jednoduchost si nyní představme případ monochromatického záření procházejícího homogenní destičkou (hodnota útlumu záření μ je všude konstantní) o tloušťce x. V takovém případě bude pokles intenzity dopadajícího záření závislý

na hodnotě útlumového koeficientu pro daný materiál a tloušťce materiálu, kterým záření prochází. Vztah pro tuto situaci můžeme zapsat v podobě:

$$dI = -\mu \cdot I \cdot dx, \tag{1.17}$$

kde dI vyjadřuje změnu v intenzitě a I označuje původní intenzitu záření. Řešením této diferenciální rovnice poté dostaneme nasledující exponenciální vztah:

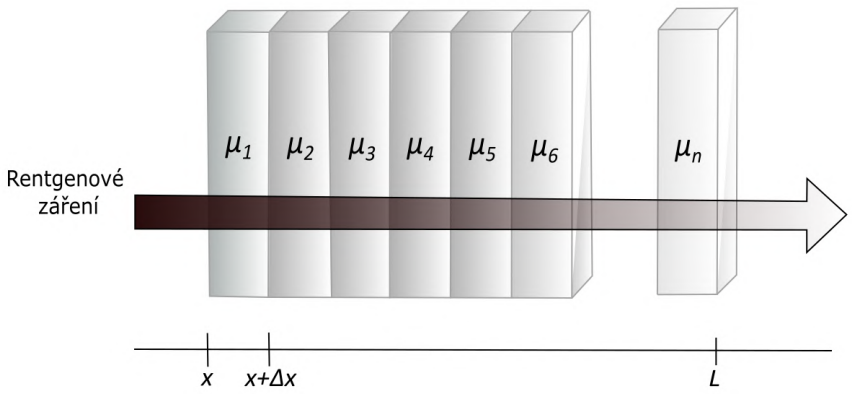
$$I(x) = I_0 e^{-\mu x}. \tag{1.18}$$

Tento vztah je známý jako Beerův-Lambertův zákon [5]. K jeho odvození jsme ovšem došli za předpokladu zcela monochromatického záření a zcela homogenní destičky. Tyto dva předpoklady jsou ale v reálných aplikacích jen těžko dosažitelné. Představme si tedy nyní případ monochromatického záření, které prostupuje materiálem, jenž není zcela homogenní a útlumové koeficienty se v něm mění. Beer-Lambertův zákon tak přejde do následující podoby [5]:

$$I(L) = I_0 e^{-\int_0^L \mu(x)dx}. \tag{1.19}$$

Tento tvar Beer-Lambertova zákona již mnohem více odpovídá reálným situacím. Částečným problémem, kterého je v reálných aplikacích relativně obtížné dosáhnout, je monochromatičnost svazku rentgenového záření (viz obr. 1.4). Provedeme proto ve tvaru Beer-Lambertova zákona ještě jednu úpravu, kde již budeme uvažovat polychromatičnost rentgenového záření. Ilustrace této situace je uvedena na obr. 1.11. Rovnice tak přejde do tvaru [5]:

$$I(L) = \int_0^{E_{max}} I_0(E) e^{-\int_0^L \mu(x)dx}. \tag{1.20}$$



Obr. 1.11: Absorpce rentgenového záření při průchodu nehomogenní látkou.

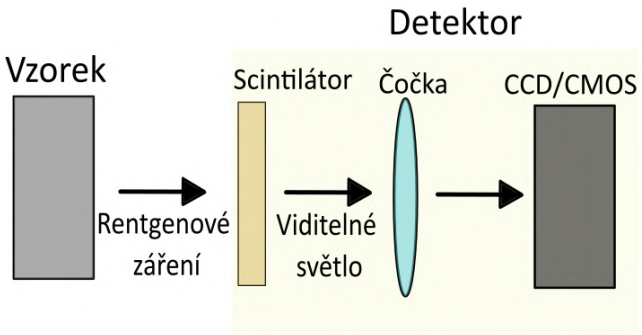
1.4 Detekce rentgenového záření

Po průchodu RTG vzorkem nastává další z klíčových částí výpočetní tomografie, a sice zaznamenání intenzity prošlého záření. K tomuto procesu se v CT přístrojích využívá detektorů rentgenového záření. Obecně je můžeme na základě jejich vlastností rozdělit do několika kategorií. V této práci bude nejprve stručně popsán jejich postupný vývoj a u dnes používaných typů detektorů bude objasněn i princip jejich fungování.

Detekce RTG byla zpočátku prováděna pomocí rentgenových filmů. Ty zaznamenávaly dopadající RTG skrze změnu jejich chemických vlastností. Detektory, sloužící k detekci rentgenového záření v tzv. první generaci tomografických přístrojů, byly detektory bodové. Jejich výhoda spočívala v kvalitě dat, jež byly schopny generovat. U tohoto typu detektoru docházelo k prakticky dokonalé eliminaci zaznamenání rozptýlených fotonů rentgenového záření. Obrovskou nevýhodou však byla jejich rychlost. Vytvoření jedné rentgenové projekce tímto způsobem mohlo trvat i několik dní [9]. Za účelem urychlení akvizice dat byly pro další generaci CT zařízení vyvinuty liniové detektory. Délka těchto detektorů se přizpůsobovala jednotlivým aplikacím. Projekce byly v tomto případě vytvářeny kolmým pohybem vzorku vzhledem k linii detektoru [9]. V polovině devadesátých let minulého století však v některých oblastech byly tyto detektory nahrazeny plošnými detektory, které dodnes patří mezi nejvíce využívané [18].

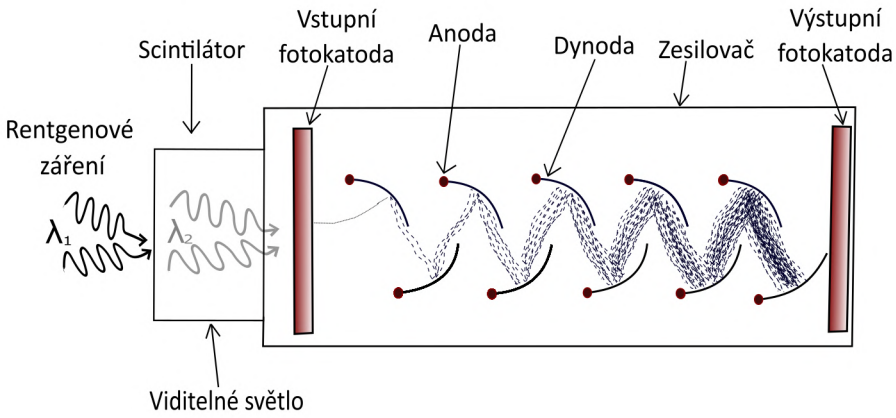
Na rozdíl od rentgenových filmů spočívá princip zaznamenání rentgenového záření na převodu dopadajícího záření na elektrický signál. Tento převod obecně dělíme na přímý a nepřímý [5]. Přímý převod je u plošných detektorů uskutečněn díky fotovodivé vrstvě, nacházející se na jejich povrchu, na kterou je přivedeno napětí [18]. Elektrony vznikají přímo při interakci rentgenového záření s touto vrstvou. Vzniklý náboj je shromažďován a měřen pixel po pixelu [9].

V případě nepřímé detekce rentgenového záření dochází po průchodu materiálem měřeného objektu k dopadu na scintilační vrstvu. Tyto vrstvy bývají nejčastěji vyrobeny z pevných látek (CsI), nicméně existují i varianty plynové (xenon) [5]. Po dopadu rentgenového záření na scintilační vrstvu dochází k prodloužení vlnové délky dopadajícího záření do oblasti viditelného světla. To je následně zpracováváno nejčastěji CCD nebo CMOS čipem, který promění viditelné světlo na digitální snímek. Jelikož za scintilační vrstvou se nachází pouze světlo z viditelné frekvenční oblasti, je možné doplnit do takto uspořádaného detektoru i systém čoček. Na základě aplikace daného tomografického přístroje můžeme obraz, v případě detailního zobrazování zvětšovat, nebo zmenšovat v případech, kdy je měřený objekt větší než je rozměr použitého čipu. Schéma popsaného detektoru s nepřímým způsobem detekce je ilustrováno na obrázku 1.12 [5].



Obr. 1.12: Schéma detektoru rentgenového záření s nepřímou detekcí. Dochází zde k převodu rentgenového záření na viditelné světlo a následné zaznamenání CCD nebo CMOS čipem.

Při zobrazování rentgenových snímků se můžeme setkat i s případy, kdy je intenzita záření, která dopadá na scintilační vrstvu, velmi nízká [18]. Pro tyto případy je možné do detektoru zakomponovat i fotonásobič. Ten se do detektoru vloží mezi scintilační vrstvu a CCD/CMOS čip. V zesilovači dopadá viditelné světlo na fotokatodu, na které dochází ke vzniku elektronu. Tyto elektrony jsou postupně urychlovány a prochází systémem dynod v zesilovači [5]. Na konci zesilovače je opět fotokatoda, jež převádí elektrony zpět na viditelné světlo, které má však mnohem vyšší intenzitu. Princip takového zesilovače je znázorněn na obrázku 1.13 [18].



Obr. 1.13: Zesilovač, který se může v případě nedostatku signálu zakomponovat do detektoru mezi scintilační vrstvu a CCD/CMOS čip.

1.5 Rekonstrukce tomografických dat

Výsledkem akvizice tomografických dat, které byla zaznamenána na detektor, jsou projekce měřeného objektu. Úkolem rekonstrukce je z těchto naměřených projekcí zkonstruovat řezy měřeného objektu. Po objasnění základních pojmů bude popsán princip analytických rekonstrukcí obrazu, zejména pak filtrované zpětné projekce.

1.5.1 Radonova transformace

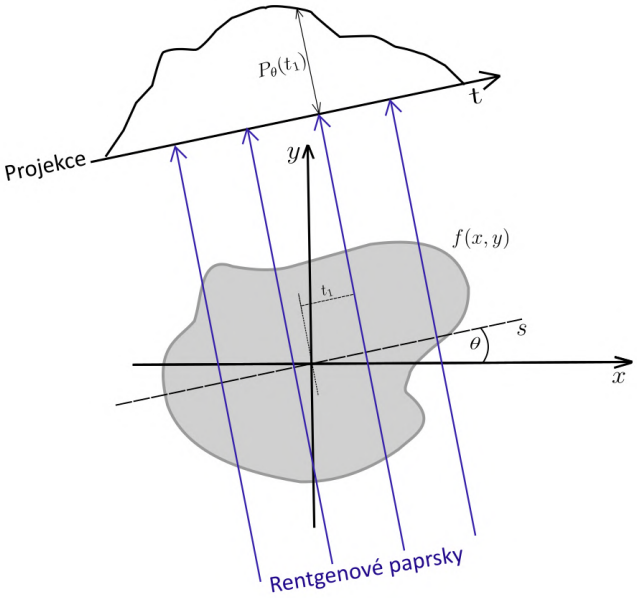
Uvažujme měřený objekt jako funkci parametru v prostoru a paralelní RTG svazek procházející objektem. Pro jednoduchost zvolíme dvourozměrnou objektovou funkci s předpisem $f(x, y)$ a počátkem v kartézském systému souřadnic (viz obrázek č. 1.14). Útlum rentgenového záření můžeme pro každý jeho paprsek popsat křivkovým integrálem. Ten pro korektnost vyjádříme pomocí proměnných θ (úhel paprsků vzhledem k ose x) a t (vzdálenost od osy rotace), pro které platí:

$$t = x\cos(\theta) + y\sin(\theta). \tag{1.21}$$

Křivkový integrál lze po zavedení tohoto systému zapsat vztahem 1.22

$$p_\theta(t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)\delta(x\cos(\theta) + y\sin(\theta) - t)dxdy, \tag{1.22}$$

kde δ označuje δ-distribuci, jejíž hodnota je nulová pro všechny body, vyjma bodu nula, kde je její hodnota nekonečná.



Obr. 1.14: Ilustrace Radonovy transformace, podle níž můžeme projekci měřeného objektu vyjádřit sadou křivkových integrálů.

Vztah 1.22 je vyjádřením tzv. Radonovy transformace [14, 17, 21]. Můžeme jej zjednodušit převedením křivkového integrálu do souřadnicového systému t a s:

$$P(\theta, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t, s)ds. \tag{1.23}$$

Projekce měřeného objektu, které byly zaznamenány detektorem, jsou pak tvořeny sadou těchto křivkových integrálů přes oblast celého objektu. Pro vizualizaci Radonovy transformace nám slouží sinogram. Tento název je odvozen z faktu, že bod v obrazovém prostoru se zobrazí jako sinusoida v Radonově prostoru [14, 17, 21].

1.5.2 Fourierův projekční teorém

Proces analytických rekonstrukčních metod je řízen teorií, která je známá pod názvem Fourierův projekční teorém. Podstata teorému se opírá o matematickou metodu zvanou Fourierova transformace, jakožto integrální metodu převádějící obraz z obrazové domény f na doménu frekvenční F [21].

Již během popisu teorie Radonovy transformace bylo definováno, že měřený objekt můžeme vyjádřit jako funkci prostoru $f(x, y)$ a jeho paralelní projekci snímanou pod úhlem θ jako funkci $p(t, \theta)$. Podle tohoto teorému je Fourierova transformace této paralelní projekce $p(t, \theta)$ rovna řezu předmětem, který prochází počátkem souřadnicového systému v 2D Fourierově transformaci předmětu pod úhlem θ [1].

Pro důkaz Fourierova projekčního teorému nejprve vyjádříme 2D Fourierovu transformaci předmětu definovanou jako

$$F_f(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y)e^{-i2\pi(ux+vy)}dxdy, \tag{1.24}$$

kde u a v jsou proměnné vyjadřující prostorové frekvence podél os x a y. Druhá část teorému pojednává o Fourierově transformaci předmětové projekce, jež byla snímaná pod úhlem θ. Tuto Fourierovu transformaci můžeme vyjádřit jako

$$F_P(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} P(\phi_0, t)e^{-i2\pi\omega t}dt, \tag{1.25}$$

kde ω vyjadřuje prostorovou projekci podél přímky t. Dosazením vztahu 1.23 do vztahu 1.25 dostaneme

$$F_P(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(t, s)e^{-i2\pi\omega t}dsdt. \tag{1.26}$$

Tato rovnice je vyjádřena v souřadnicovém systému t a s. Pro jednoznačné dokázání platnosti Fourierova projekčního teorému se za pomocí vztahů vyjádřených v rovnici 1.21 přesuneme zpět do kartézkého souřadnicového systému x a y. Transformací jsme získali vztah:

$$F_P(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y) e^{-i2\pi\omega(x\cos(\theta_0)+y\sin(\theta_0))} dxdy. \tag{1.27}$$

Porovnáním rovnic 1.24 a 1.25 docházíme k závěru, že jsou tyto vztahy totožné. Jinými slovy je Fourierova transformace projekce měřeného objektu v libovolném úhlu rovna řezu v 2D Fourierově transformaci předmětu snímaného pod stejným úhlem. Tedy přesně tak, jak říká Fourierův projekční teorém [1, 17, 21].

1.5.3 Filtrovaná zpětná projekce

Na základě znalosti Fourierova projekčního teorému a Radonovy transformace je v této podsekci popsána jedna z nejvyužívanějších analytických rekonstrukčních technik, a sice filtrovanou zpětnou projekci.

Pro popis této techniky zavedeme nejprve inverzní Fourierovu transformaci předmětové funkce jako

$$f(x,y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(u,v) e^{i2\pi(ux+vy)} dudv. \tag{1.28}$$

Tuto integrovanou funkci $F(u,v)$ převedeme pomocí vztahů 1.29 a 1.30 do polárních souřadnic:

$$u = \omega\cos(\theta) \tag{1.29}$$

$$u = \omega\sin(\theta) \tag{1.30}$$

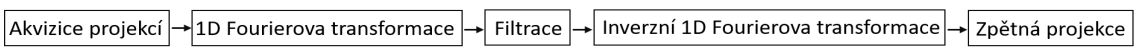
Rovnice 1.28 tak přejde do tvaru:

$$f(x,y) = \int_{0}^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega,\theta) e^{i2\pi(x\cos(\theta)+y\sin(\theta))} |\omega| \, d\omega d\theta. \tag{1.31}$$

Zavedením substituce $Q(\theta,t) = \int_{-\infty}^{\infty} F_P(\omega,\theta) e^{i2\pi\omega t} |\omega| \, d\omega$ přechází vztah 1.31 do tvaru

$$f(x,y) = \int_{0}^{2\pi} Q(\theta,t) d\theta. \tag{1.32}$$

Rovnice 1.32 vyjadřuje filtrovanou zpětnou projekci v celém procesu popisovaného rekonstrukce, kde $|\omega|$ je nazývána filtrem. Filtr v této podobě je na reálných datech nepraktický, jelikož jeho důsledkem je zvýraznění vysokých frekvencí (šumu). Aby tomuto bylo zamezeno, je v praxi násoben funkcí, která je v jistém bodě nulová [14, 21] Celý postup tohoto analytického rekonstrukčního přístupu je schématicky znázorněn schématem 1.15.



Obr. 1.15: Schéma celého procesu filtrované zpětné projekce.

2 Fázový kontrast ve výpočetní tomografii

Výpočetní tomografie je založena na detekci rentgenového záření, které prošlo zkoumaným vzorkem. Standardně se k získání informace o vzorku využívá absorpce tohoto záření, tedy změny jeho intenzity po průchodu vzorkem. Bohužel tento přístup má své limity, a to zejména při měření vzorků, jež vykazují malý útlum rentgenového záření, nebo pokud je vnitřní struktura zkoumaného objektu složena z materiálů, jejichž útlum je velmi podobný. V těchto případech není dosaženo dostatečného kontrastu pro zisk informace o vnitřní struktuře.

Tato kapitola bude popisovat čtyři nejznámější metody zobrazování ve fázovém kontrastu, jakožto přístupů sloužících k překračování limitů absorpční tomografie. Práce se zaměří zejména na metodu volného šíření, která bude i předmětem zkoumání v experimentální části této práce.

Na základě první kapitoly předložené práce by se mohlo zdát, a to zcela záměrně, že během interakce rentgenového záření s látkou dochází pouze k jeho útlumu. První kapitola byla totiž věnována absorpční (konvenční) výpočetní tomografii, a proto jsme se v sekci 1.3 zabývali pouze útlumem, jelikož ten tvoří její podstatu. Na začátku této kapitoly se tedy bude kapitola krátce věnovat indexu lomu, který bude využit k uvedení zobrazování ve fázovém kontrastu do kontextu.

2.1 Index lomu

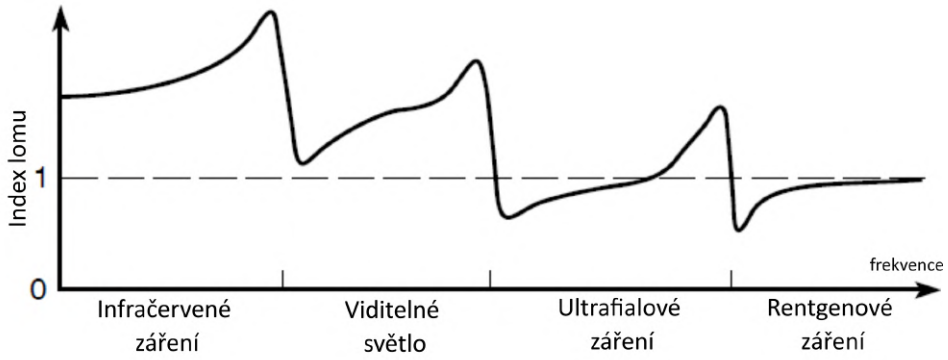
Rychlost, s níž se šíří elektromagnetické záření ve vakuu, je obecně označována jako rychlost světla c. Je definována jako fázová rychlost tohoto elektromagnetického vlnění a její hodnota je 299 792 458 m/s [22]. Jakmile se ale světlo šíří v prostředí látky, je tato rychlost (v_m) nižší. Poměr těchto dvou rychlostí (viz vztah 2.1) se označuje jako index lomu

$$n = \frac{c}{v_m}. \tag{2.1}$$

Jedná o bezrozměrnou veličinu, charakterizující změnu směru šíření záření na rozhraní dvou prostředí s odlišnými indexy lomu. Kvantitativně je index lomu popisován Snellovým zákonem [22, 23]. Z optického hlediska se dá index lomu považovat i za materiálovou charakteristiku, protože je závislý na druhu či hustotě látky [23].

Tato veličina není závislá pouze na materiálu dané látky, ale její hodnota se rovněž silně odvíjí od frekvence samotného elektromagnetického záření. Obrázek 2.1 ukazuje, jak se hodnota indexu lomu v jednom prostředí pro různé frekvence záření liší. Na tomto obrázku lze rovněž pozorovat i ostré peaky a následné prudké poklesy. Tento projev je způsoben rezonancí, jež odpovídá elektronovým přechodům v atomech a molekulách. Po rezonanční frekvenci dochází k prudkému snížení hodnoty

indexu lomu. Důsledkem je indexu lomu v rentgenové oblasti menší než 1 [9, 23]. Ano, hodnota indexu lomu může nabývat i hodnot menších než 1, jelikož vztah 2.1 je definován na základě fázové rychlosti, která nenese žádnou informaci.



Obr. 2.1: Ilustrace změny hodnoty indexu lomu v závislosti na frekvenci elektromagnetického záření [23].

2.1.1 Komplexní index lomu

V sekci 1.3 byly popsány typické interakce, které nastávají při průchodu rentgenového záření látkou a způsobují tak celkový útlum záření. Nicméně během průchodu záření látkou nedochází pouze k útlumu, ale i k lomu a fázovému posunu záření. Obecně je tedy index lomu komplexní veličinou a pro oblast rentgenového záření se tedy může vyjádřit ve tvaru [24]

$$n = 1 - \delta + i\beta. \tag{2.2}$$

Reálná část vztahu vyjadřuje fázový posun vzhledem k vlně šířící se ve vakuu a způsobuje, že hodnota indexu lomu je menší než 1. Z největší části k tomuto posuvu přispívá elastický Thomsonův rozptyl. Imaginární část tohoto zápisu β vyjadřuje útlum rentgenového záření a je úzce spjata s útlumovým koeficientem μ definovaným v sekci 1.3.4. Vztah mezi těmito dvěma proměnnými je [24, 25]

$$\mu = \frac{4\pi\beta}{\lambda}. \tag{2.3}$$

Vztah 2.2 velmi dobře slouží k představě o tom, jak rentgenové záření interaguje s látkou. V principu by se hodnoty reálné (δ) a imaginární části (β) této rovnice daly experimentálně určit změřením absorpce a fázového posuvu. Nicméně v případě reálné části se tento přístup jeví, zejména pro oblast nízkoenergetického rentgenového záření, jako nerealizovatelný, jelikož je těžké určovat posuv ve fázi s absolutní přesností. Je tedy výhodné definovat pojem atomového rozptylového koeficientu. Tato

veličina vyjadřuje rozptyl způsobený jednotlivými atomy v látce. Jeho hodnota vyjadřuje, jak silně atomy daného prvku interagují s rentgenovým zářením. Jedná se o komplexní veličinu, kterou lze zapsat ve tvaru

$$f(\omega) = f_1(\omega) - if_2(\omega). \tag{2.4}$$

Z rovnice 2.4 je zřejmé, že atomový rozptylový faktor je, stejně jako index lomu, frekvenčně závislá veličina. Komplexní index lomu lze vyjádřit kromě tvaru 2.2 i skrze atomový rozptylový faktor, a sice

$$n(\omega) = 1 - \frac{\rho N_a r_e \lambda^2}{M_a 2\pi}(f_1(\omega) - if_2(\omega)). \tag{2.5}$$

Proměnná ρ vyjadřuje hustotu materiálu, N_a Avogardovu konstantu, M_a molární hmotnost a r_e klasický poloměr elektronu. Porovnáním vztahů 2.2 a 2.5 vidíme, že koeficienty δ a β z rovnice 2.2 můžeme vyjádřit i jako násobky atomového rozptylového koeficientu [23]

$$\delta = \frac{\rho N_a r_e \lambda^2}{M_a 2\pi} f_1(\omega), \tag{2.6}$$

$$\beta = \frac{\rho N_a r_e \lambda^2}{M_a 2\pi} f_2(\omega). \tag{2.7}$$

Reálná část a imaginární část vztahu 2.4 jsou spolu provázány Kramersovými–Kronigovými relace. Odvození platnosti těchto vztahů je uvedeno například v [23]. Z rozptylového koeficientu f_1 lze tak spočítat koeficient f_2 a naopak. Následně je možné, s využitím vztahů 2.6 a 2.7, vyjádřit i koeficienty δ a β.

V praxi je možné například určit nejprve vztahem 2.8 rozptylový koeficient f_2. Veličina A vyjadřuje atomovou hmotnost daného prvku a m_u je atomová hmotnostní jednotka. Hodnoty tohoto koeficientu byly tabelovány měřením absorpce záření přes tenké vrstvy jednotlivých prvků pro širokou škálu energií [23, 26]. Tato měření byla prováděna pomocí synchrotronového zdroje rentgenového záření a monochromátoru. Následně se skrze Kramersovy-Kronigovy vztahy koeficient dopočítal rozptylový koeficient f_1. Atomové koeficienty byly tímto způsobem určeny a tabelovány pro prvky 1–92 periodické soustavy prvků (vodík–uran).

$$f_2(\omega) = \frac{A m_u}{2 r_e \lambda} \mu(\omega) \tag{2.8}$$

Oba koeficienty (δ, β) jsou tedy závislé na hustotě materiálu, jeho protonovém čísle a energii dopadajícího záření [24]. Hodnota koeficientu δ je pro materiály s nízkou hustotou vždy přibližně 100–1000krát větší než hodnota β. Její hodnota rovněž v porovnání s koeficientem β pomaleji klesá s rostoucí energií RTG [24]. Pro materiály s nízkou hustotou jsou hodnoty δ a β řádově 10^{-5}–10^{-6} a 10^{-8}–10^{-9} [18, 25]. Kombinace těchto vlastností dává příslib k možnému překročení limitů absorpční výpočetní tomografie.

2.2 Metody zobrazování ve fázovém kontrastu

Zobrazování ve fázovém kontrastu bylo obecně objeveno začátkem 30. let 19. století fyzikem Fristem Zernikem. Za tento objev získal v roce 1953 Nobelovu cenu. Objevil jej však pro oblast viditelného světla [18]. Jelikož viditelné světlo i RTG patří mezi elektromagnetická vlnění, fungují stejné principy i pro oblast RTG. Vlnové délky jsou ale v oblasti RTG mnohem kratší, a tak trvalo několik let, než se podařilo objevit techniky, které jsou schopny využívat fázového kontrastu i v rentgenových zařízeních [18].

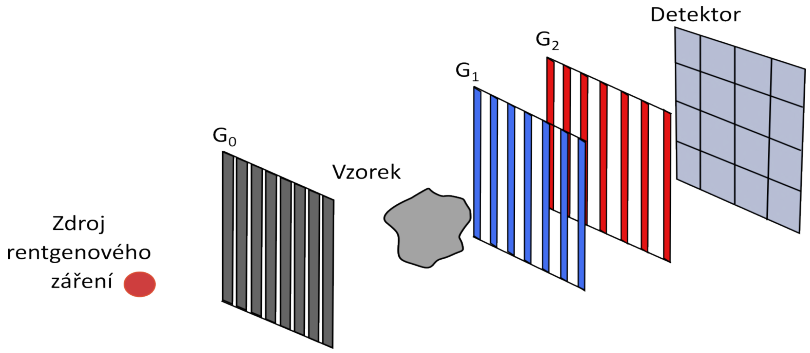
2.2.1 Rentgenová mřížková interferometrie

Mřížková interferometrie je metoda, jejíž kořeny sahají až do roku 1801, kdy britský matematik a fyzik Thomas Young provedl velmi známý dvouštěrbinový experiment, ve kterém prokázal interferenci světla. Přestože Young při experimentu využil viditelné světlo, je možné jej provést i s rentgenovým zářením [3]. V případě, že dochází ke střetu dvou vln, které jsou vzájemně ve fázi, nastává tzv. konstruktivní interference. Ta se na detektoru projeví jako světlý proužek. Naopak v případě dvou od sebe fázově posunutých vln hovoříme o destruktivní interferenci a projevem je proužek tmavý. Na detektoru tak vlivem této podstaty světla detekujeme vyšší a nižší počet fotonů [3].

Jak již z názvu metody vypovídá, pro měření se do cesty rentgenového záření vkládají mřížky. Z důvodu velmi krátké vlnové délky rentgenového záření musí být perioda mřížek velmi malá (řádově jednotky mikrometrů) [27]. Tato metoda původně využívala pouze dvě mřížky umístěné za vzorkem mezi nimiž docházelo k Talbotově efektu. Proto bývá mřížková interferometrie v tomto uspořádání označována také jako Talbotova interferometrie. Toto uspořádání však vyžaduje velmi výkonné rentgenové zdroje produkující vysoce koherentní rentgenové záření, což velmi ztěžuje implementaci této metody do laboratorních či komerčních přístrojů [28]. V roce 2006 německý fyzik Franz Pfeiffer zakomponoval do Taboltova interferometru třetí mřížku, kterou umístil přímo za zdroj rentgenového záření. V tomto uspořádání mezi mřížkami nastává nejen Talbotův efekt, ale též k Laueho efekt. Mřížková interferometrie v této konfiguraci označuje jako Talbotova-Laueho interferometrie [28]. Systém využívající tří mřížek je znázorněn na obrázku 2.2.

První mřížka (G_0) je umístěna přímo za zdroj rentgenového záření a jejím úkolem je vytvořit z dopadajícího nekoherentního RTG několik koherentních liniových zdrojů. Koherenční délka vzniklého záření je $l_c = \frac{2\lambda d}{g_0}$, kde λ je vlnová délka dopadajícího záření, d je vzdálenost mřížky od zdroje a g_0 je perioda mřížky [27]. Z tohoto důvodu bývá označována jako zdrojová mřížka [3]. Druhou mřížku (G_1), umístěnou

za měřeným objektem, nazýváme fázovou mřížkou. Dochází na ní ke vzniku periodického interferenčního obrazce, který by se v případě měření bez vzorku projevil ve formě paralelních proužků [3]. Nicméně vzhledem k přítomnosti měřeného vzorku dojde k posunu a zakřivení některých proužků [28]. Tento interferenční obrazec je ovšem obvykle menší, než pixely detektoru. Třetí mřížkou (G_2) je analyzér převádějící zakřivení a posun interferenčních proužků na intenzitní signál. Umožňuje tak přímo detekovat změny v interferenčním obrazci [3, 14].



Obr. 2.2: Schéma Talbotova-Laueho interferometru, který se skládá ze tří mřížek tvořících na detektoru interferenční obrazec.

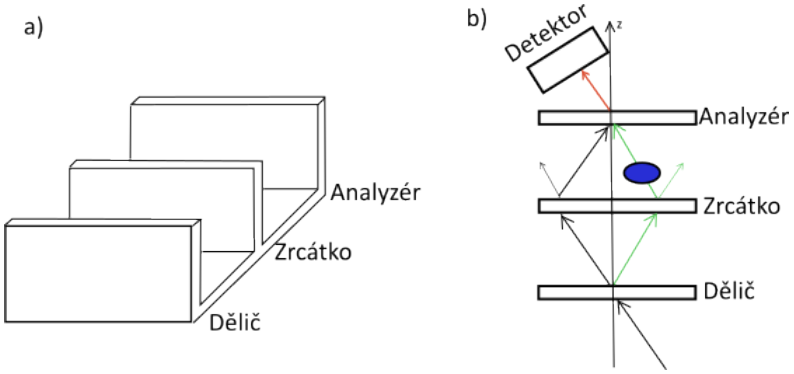
2.2.2 Rentgenová krystalová interferometrie

Metoda zobrazování ve fázovém kontrastu je založena na použití krystalového interferometru, který v roce 1965 představili fyzikové Bonse a Hart [30]. Krystalová interferometrie slouží k přímému experimentálnímu sledování rozptylových vlastností zkoumaných objektů [29].

Krystalový interferometr je v tomto případě vyroben z křemíku a skládá se ze tří základních paralelních částí (viz 2.3 a)). Na první části, zvané dělič, je dopadající rentgenový svazek rozdělen na dva identické monochromatické svazky. Jakmile svazek dopadne na zrcátko, je opět rozdělen na dva svazky. Nicméně pouze vnitřní dva z nich jsou použity pro měření. Jednomu z nich je do cesty umístěn vzorek, jenž způsobí fázové posunutí jedné vlny vůči druhé. Tyto dva svazky se spolu setkávají na analyzéru. Interferenční obrazec je pak zaznamenáván na detektoru [29]. Celý princip je rovněž ilustrován na obrázku 2.3 b). Vzniklé projekce mohou být rekonstruovány například použitím Fourierovou rekonstrukcí [31].

Tato metoda nenachází v porovnání s ostatními metodami velké uplatnění, jelikož je zde nutná absolutní stabilita vzorku [29]. U většiny vzorků, zejména v případě biologických tkání, je naprostá stabilita velmi těžko dosažitelná. Protože je interferometr vyroben z jednoho krystalu, neprovádí se žádné přesné zarovnávání a seřizování vyjmenovaných součástí [28]. Zorné pole, tedy maximální velikost vzorku, jež jsme

schopni naměřit, je v tomto případě omezeno velikostí krystalu, ze kterého je interferometr vyroben [29]. Největší krystaly využívané k výrobě těchto interferometrů mají rozměry 70 x 70 mm [14, 32].

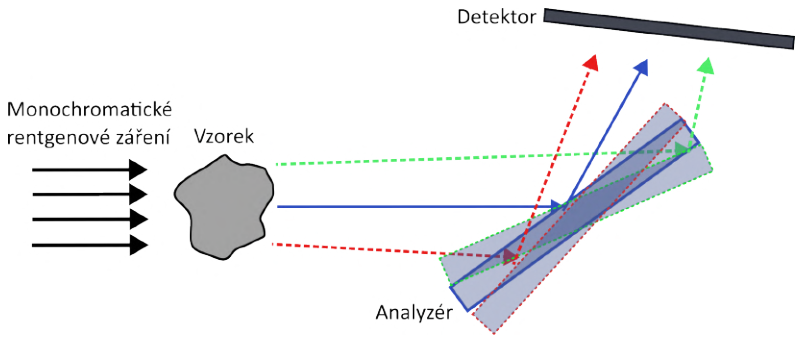


Obr. 2.3: a) Schéma krystalového interferometru vyrobeného křemíkového krystalu. b) Princip tvorby obrazu s využitím křemíkového interferometru.

2.2.3 Rentgenové zobrazování pomocí analyzéru

Metoda zobrazování ve fázovém kontrastu pomocí analyzéru byla poprvé aplikována již v roce 1979 fyzikem Goetzem, který tuto techniku používal pro studium vnitřní struktury pelet sloužících v experimentech termonukleárních fúzí [24, 34]. Uplatnění této metody se ale nejvíce rozvíjelo až po roce 1995, kdy byly vyvinuty kvantitativní techniky na analýzu absorpčních a fázových příspěvků v naměřených projekcích [34]. Tato metoda je v literatuře dohledatelná rovněž pod názvy *Schlieren method* nebo *diffrection-enhanced x-ray imaging*[29, 35].

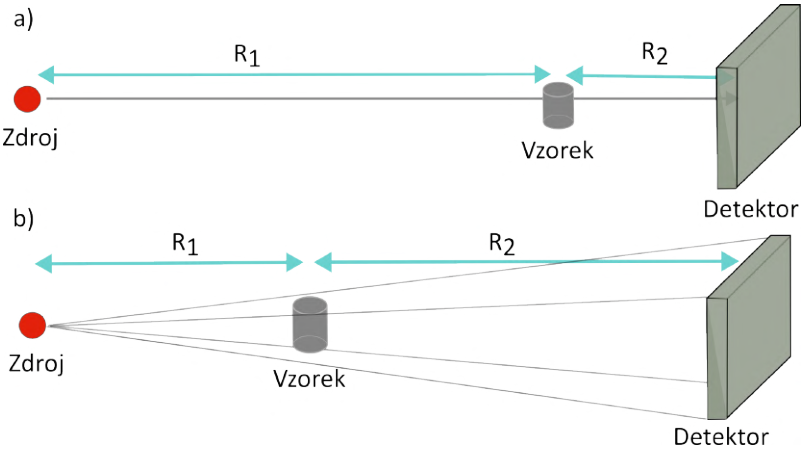
Jedná se o metodu založenou na použití paralelního monochromatického svazku rentgenového záření a tzv. analyzéru, kterým je krystal umístěn za měřeným objektem, jenž difraktuje rentgenové záření. Kvůli podmínce monochromatického záření jsou v případě polychromatických zdrojů RTG záření vloženy další krystaly. Ty slouží jako monochromátory a kolimátory [34]. Analyzér v tomto uspořádání difraktuje pouze záření splňující Braggovu difrakční podmínku [24]. K difrakci tedy dojde pouze v případě, že vzdálenost mezi rovinnými strukturami krystalu odpovídá celočíselnému násobku vlnové délky RTG. V počátku je orientace analyzéru nastavena tak, aby nedifraktoval záření, jehož vlnoplocha byla vzorkem změněna. Výběr paprsků, které analyzátor zalomí, je posléze ovlivňován jeho mírným nakláněním [24]. Takovým způsobem je poté možné zaznamenávat různé změny vlnoploch [14]. Schéma této metody je zakresleno na obrázku 2.4.



Obr. 2.4: Schéma zobrazování ve fázovém kontrastu s využitím analyzéru. Záření, které nebylo difraktováno vzorkem (modrá), splňuje Braggovu podmínku pro původní (modré) naklonění analyzéru, a proto na analyzéru bude difraktováno. Pro difrakci dalších paprsků je nutné analyzátor mírně naklánět. Červená a modrá šipka reprezentuje záření jehož původní směr byl ve vzorku odchýlen. Tyto paprsky jsou analyzérem difraktované pouze při jeho vhodném naklonění.

2.2.4 Metoda volného šíření záření a zpracování dat

Poslední způsob zobrazování ve fázovém kontrastu, který bude v této práci popsán, je metoda volného šíření záření (z angl. „propagation based method“). S touto metodou přišel v roce 1995 fyzik Anatoly Snigirev [28, 36]. V porovnání s ostatními fázovými technikami se jedná o nejjednodušeji implementovatelnou metodu. Její uspořádání je totiž naprosto stejné, jako v případě konvenčních absorpčních počítačových tomografů (viz 2.5) [24].



Obr. 2.5: Schéma uspořádání pro zobrazování metodou volného šíření a) s paralelním svazkem rentgenového záření, b) s kuželovitým svazkem rentgenového záření.

Skládá se tedy pouze z rentgenového zdroje, měřeného objektu a detektoru [28]. Právě díky své jednoduchosti a efektivitě je jednou z nejrozšířenějších metod zobra-

zování ve fázovém kontrastu [37]. Tato technika je v literatuře rovněž dohledatelná jako *in-line phase contrast imaging* [24].

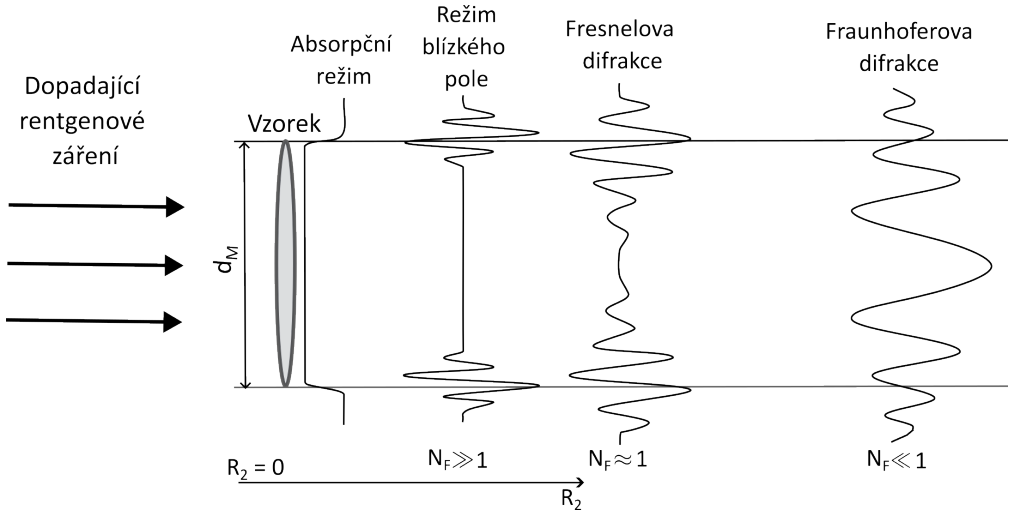
Rentgenové záření, procházející vzorkem, je na okrajích a vnitřních strukturách vzorku difraktováno [14]. V důsledku interference mezi těmito difraktovanými vlnami dochází, stejně jako v případě viditelného světla, ke vzniku difrakčního obrazce [24]. Aby tento efekt byl pozorovatelný, musí být detektor umístěn v dostatečné vzdálenosti od měřeného objektu. Tento efekt se projevuje ve formě kontrastu v získané rentgenové projekci. Vznikající kontrast se výrazně zvyšuje se zvětšující se efektivní vzdáleností vzorku od detektoru D, kterou definujeme jako

$$D = \frac{R_1 \cdot R_2}{R_1 + R_2}, \tag{2.9}$$

kde R_1 je vzdálenost zdroje rentgenového záření od vzorku a R_2 vzdálenost vzorku od zdroje [25]. Na základě této vzdálenosti a velikosti zkoumaného objektu rozlišujeme čtyři různé zobrazovací režimy, jejichž hranice je určena hodnotou Fresnelova čísla [14]

$$N_F = \frac{d_M^2}{\lambda D}, \tag{2.10}$$

kde d_M je příčná velikost pozorovaného vzorku, jak je znázorněno na obrázku 2.6.



Obr. 2.6: Ilustrace rozdělení jednotlivých zobrazovacích režimů metody volného šíření záření [14].

Na obrázku 2.6 je ilustrováno, že se pro hodnotu $R_2 \to 0$ jedná o tzv. absorpční režim, v němž není pozorovatelný žádný projev fázového kontrastu. Pro hodnotu $N_F \gg 1$ se jedná o režim blízkého pole (z angl. „near field“), ve kterém dochází k lokálnímu zvýraznění struktur. Jestliže je hodnota $N_F \approx 1$, hovoříme o Fresnelově difrakci. Poslední případ, režim Fraunhoferovy difrakce, nebo také dalekého pole,

nastává jestliže je hodnota $N_F \ll 1$ [25, 14, 36]. Pro metodu volného šíření je využíván pouze režim blízkého pole, ve kterém dojde v naměřených projekcích ke zvýšení kontrastu všech hran [24]. Tento efekt se projevuje ve formě zřetelného světlého a tmavého proužku na všech hranách jednotlivých struktur. Nazýváme jej nejčastěji zvýrazněním hrany (z angl. „edge enhancement“) nebo také haló efektem [25, 24]. Šířka tohoto zvýraznění je podle [24] definována

$$\xi = \sqrt{R_2 \lambda}. \tag{2.11}$$

Na základě těchto předpokladů a vztahu 2.11 je tedy vhodné vzorek umístit do největší možné vzdálenosti od detektoru, která ještě vyhovuje podmínkám blízkého pole. Nicméně větší vzdálenost od detektoru přináší i postupnou ztrátu prostorového rozlišení, jehož následkem je rozostřování obrazu. Pro případ paralelního svazku RTG záření (viz obrázek 2.5 a)) je rozostřování obrazu určeno polohami zdroje a detektoru vůči vzorku a také velikostí stopy zdroje (FS). Vztah pro popis rozmazávání ostrých přechodů můžeme těmito parametry vyjádřit následovně

$$\sigma_p = \sigma_s \cdot \frac{R_2}{R_1}, \tag{2.12}$$

kde σ_s označuje velikost stopy zdroje. Ideálně by tato hodnota měla být menší než je hodnota ξ. V případě rozbíhavého svazku záření (viz 2.5 b)) přejde vztah 2.11 do tvaru

$$\xi = M\sqrt{D\lambda}, \tag{2.13}$$

kde M je geometrické zvětšení $M = (R_1 + R_2)/R_1$ [24]. I v tomto případě by měla být hodnota σ_p ideálně menší než je hodnota parametru ξ. Při hledání vhodného umístění vzorku do přístroje je tedy nutné najít vzdálenost, v níž dojde k dostatečnému zvýraznění všech vnitřních struktur a nedojde k výraznému rozostření obrazu.

Na rozdíl od ostatních způsobů zobrazování ve fázovém kontrastu, nevyžaduje tato metoda podmínku monochromatičnosti RTG. Označení vlnové délky v této podsekci odpovídá průměrné vlnové délce generovaného polychromatického svazku. Na druhou stranu je pro tuto metodu vyžadována relativně vysoká míra prostorové koherence [24, 34]. Tato metoda je založena na interferenci záření a k té dochází pouze za předpokladu, že jsou vlny vzájemně koherentní [38]. Koherenci záření generovaného zdrojem s konečnou velikostí stopy (FS) můžeme definovat příčnou koherenční délkou

$$L_\perp = \frac{\lambda R_1}{\sigma_s}. \tag{2.14}$$

Hodnota vypočtená vztahem 2.14 vyjadřuje, na jakých dvou od sebe vzdálených strukturách ještě bude pozorovatelná interference. Pro praktické zjištění, zda je záření dostatečně koherentní se v [38] zavádí pojem tzv. *shearing length*, jenž definuje difrakci paprsků mezi vzorkem a detektorem. Tuto veličinu definujeme vztahem

$$L_{shear} = \frac{\lambda R_2 \, |u|}{M}, \tag{2.15}$$

kde $|u|$ označuje prostorovou frekvenci struktur v objektu [38]. Pro vyjádření dostatečné koherence se poté definuje poměr $L_{shear}/L_{\perp}$, který musí být menší než 1 [14, 38]. V případě, že tomu tak není, projevy fázového kontrastu nebudou v měření pozorovatelné.

Pomocí této metody, kdy umístíme vzorek do dostatečné vzdálenosti od detektoru, docílíme zvýraznění struktur ve vzorku. To se projeví ve formě hranového efektu [24]. Oproti ostatním metodám zobrazování ve fázovém kontrastu není metoda volného šíření zatížena aberacemi, které by do naměřených dat vnášely jednotlivé komponenty [39].

Nevýhodou této jednoduše implementovatelné metody je, že naměřená projekční data neposkytují přímo fázovou informaci [39]. V důsledku toho by výsledkem tomografické rekonstrukce byly tomografické řezy, kde by měly struktury objektu mezi sebou velmi nízký kontrast. Jejich vzájemná rozlišitelnost by tak byla velice náročná [40, 41]. Pro zvýšení kontrastu mezi jednotlivými strukturami měřeného objektu se na data aplikuje algoritmus zvaný *phase retrieval*, jehož efektem je právě detekce zvýrazněných hran a vytvoření modifikovaných projekčních dat se zvýšeným kontrastem. Tato data jsou poté zrekonstruovaná klasickým rekonstrukčním procesem, který byl popsán v sekci 1.5 [40].

Zpracování dat

Od devadesátých let minulého století byla vyvinuta spousta algoritmů sloužících k zisku fázové informace z naměřených projekčních dat. Základní rozdělení je stejné jako v případě rekonstrukčních přístupů. Dělíme je tedy na iterativní a analytické metody [14, 40]. Ty se od sebe liší zejména v množství potřebných dat a ve výpočetních časech [39]. Tato práce je omezena pouze na analytické metody.

Některé z analytických metod vyžadují, aby byl objekt naměřen v několika (alespoň dvou) různých vzdálenostech od detektoru [39]. Pro jedno kompletní tomografické měření je potřeba stovek (někdy i tisíců) projekcí. Tento přístup je náročný jak z hlediska časového, tak z hlediska objemu naměřených dat [39]. Existují ovšem i přístupy, které jsou schopny informaci o změně fáze získat i z projekčních dat naměřených v jedné vzdálenosti. Obecně se v literatuře vyskytuje sedm různých analytických algoritmů, vyžadujících měření objektu pouze v jedné vzdálenosti od

detektoru [39]. Jmenovitě jsou to: Bronnikův algoritmus [42], modifikovaný Bronikův algoritmus [43], algoritmus fázové a útlumové duality [44], Paganinův algoritmus [45], duálně-materiálový algoritmus [46], Fourierova metoda s Bornovou aproximací a Rytova aproximace [47]. Porovnání těchto algoritmů, jejich kritérií, výhod a nevýhod, je možné najít například v [39] a [48].

Základním a jedním z nejvíce rozšířených algoritmů je Paganinův *phase retrieval* algoritmus [37]. Vychází z rovnice přenosu intenzity (z angl. „transport of intensity equation"), kterou můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\nabla_\perp \left[I_z(x,y) \nabla_\perp \varphi_z(x,y) \right] = -\frac{2\pi}{\lambda} \frac{\partial I_z(x,y)}{\partial z}, \tag{2.16}$$

kde $\nabla_\perp = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$, I je intenzita záření a ϕ označuje fázi.

Vznikl paraxiální aproximací šíření vlny po průchodu předmětem [14, 48]. Předpokladem tohoto algoritmu je homogenita (δ = konst.) měřeného objektu. Na základě tohoto předpokladu jsme schopni vyjádřit změnu fáze jako veličinu úměrnou tloušťce měřeného objektu vztahem

$$\varphi(x,y) = -\frac{2\pi\delta}{\lambda} t(x,y), \tag{2.17}$$

kde t je tloušťka objektu, x a y je kartézský souřadnicový systém naměřených dat [48, 40]. Tuto tloušťku jsme z projekčních dat naměřených v jedné známé pozici od detektoru schopni vypočítat pomocí rovnice

$$t(x,y) = -\frac{1}{\mu} \left(F^{-1} \left\{ \frac{F[I(x,y)/I_0(x,y)]}{1 + z\delta\mu^{-1}(u^2+v^2)} \right\} \right), \tag{2.18}$$

kde μ je koeficient absorpce, F a F^{-1} jsou Fourierova a zpětná Fourierova transformace [40]. Útlumový koeficient μ vypočítáme vztahem 2.3. Kombinací vztahů 2.17, 2.18 a 2.3, přejde vztah 2.18 do tvaru

$$\varphi(x,y) = -\frac{\delta}{2\beta} \left(F^{-1} \left\{ \frac{F[I(x,y)/I_0(x,y)]}{1 + \left[\frac{\delta}{\beta} \cdot \left(\frac{\lambda z}{4\pi} \right) \right] (u^2+v^2)} \right\} \right). \tag{2.19}$$

Vidíme, že data, která jsou výsledkem tohoto algoritmu, jsou závislá na poměru koeficientů δ a β. Výsledek algoritmu tedy bude správný, určíme-li vhodně tento vstupní parametr. Předpoklady na jejichž základě byl algoritmus odvozen jsou:

a) měřený objekt je homogenní (poměr δ a β je stejný v celém objemu vzorku),

b) ‚opadající vlna rentgenového záření je rovinná, nebo je jeho vlnoplocha mírně zakřivená,

c) zdálenost vzorku od detektoru splňuje podmínku zobrazování v blízkém poli [40].

V praxi je však dokázáno, že i když nejsou tyto tři podmínky dokonale naplněny, výsledky tohoto robustního algoritmu jsou správné [40].

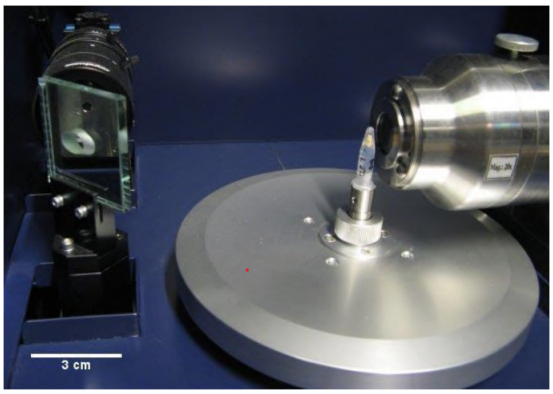
3 Experimentální část

Tato kapitola postupně popisuje experimenty a analýzy, které byly v rámci této práce provedeny za účelem optimalizace metody rentgenové počítačové tomografie v oblasti zobrazení materiálů s nízkou hustotou. Všechny experimenty byly provedeny v prostorách laboratoře rentgenové počítačové tomografie a nanotomografie CEITEC VUT, konkrétně na přístroji Rigaku Nano 3DX. Práce navazuje na diplomovou [14] a disertační práci [48] Ing. Dominiky Kalasové, Ph.D, která se ve svých pracích metodou volného šíření na přístroji Rigaku Nano 3DX rovněž zabývala. Mezi cíle této práce patří: analýza vlastností měřených vzorků na efekt fázového kontrastu, vytvoření metodiky pro měření ve fázovém kontrastu, realizace měření a jejich analýza.

3.1 Rigaku Nano 3DX

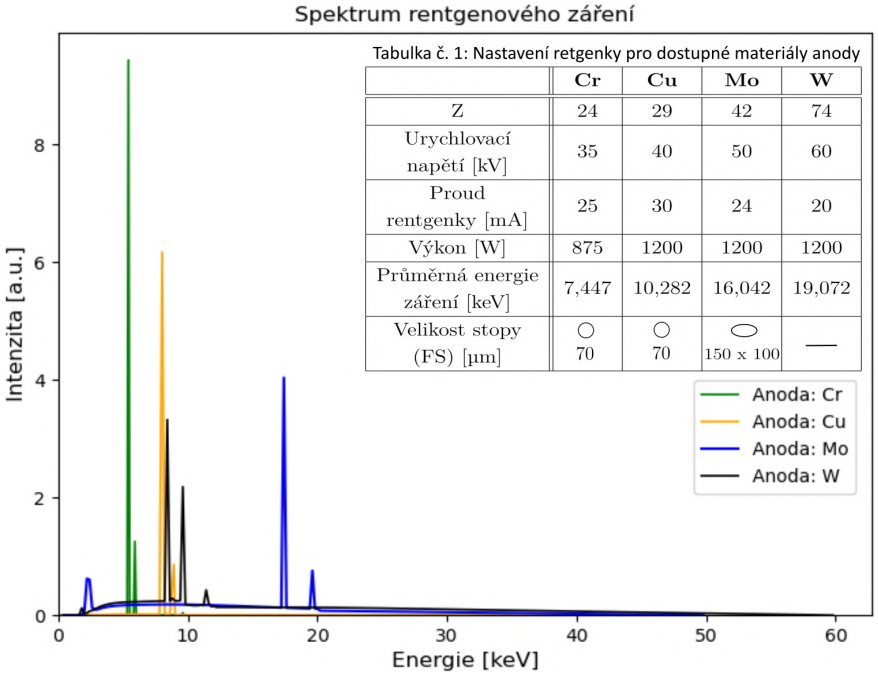
Přístroj Rigaku Nano 3DX (viz 3.1 a 3.2) je rentgenový mikroskop vyvinutý japonskou společností Rigaku. Do laboratoře počítačové tomografie CEITEC VUT v Brně byl nainstalován již v roce 2014. Jednalo se o vůbec první instalaci Nano 3DX v Evropě. Instalace tohoto přístroje s vysokým prostorovým rozlišení tak umožnila rozvoj například v oblasti analýzy nanovláken nebo biologických aplikací [49].

Obr. 3.1: Rigaku Nano 3DX – náhled na celý přístroj [50].



Obr. 3.2: Rigaku Nano 3DX – měřicí komora. Vpravo vidíme zvětšovací optiku, kterou prochází záření před dopadem na detektor. Před optikou je na rotační platformě umístěn vzorek, za zrcátkem je optická kamera sloužící ke kontrole pozice vzorku [14].

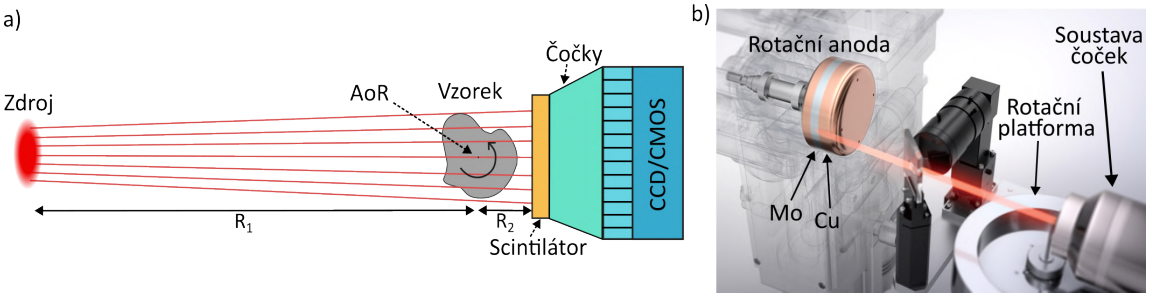
Zdrojem rentgenového záření v tomto přístroji je rentgenka MicroMax-007 HF [50]. Jedná se o zdroj využívající rotační anodu, která je zároveň chlazena externím chladícím zařízením na bázi vodního okruhu. Standardně jsou k přístroji dostupné anody vyrobené z chromu (Cr), mědi (Cu), molybdenu (Mo) a wolframu (W) [50]. Pro každou z anod je generováno rentgenové záření, jež se liší v průměrné energii fotonů i pozici charakteristických peaků (viz obrázek 3.3) [7]. Výběr materiálu anody pro dané měření závisí na složení a tloušťce měřeného vzorku. V případě vzorků s vyšším útlumem se obecně používá záření s vyšší energií (např. Mo). Pro každou z anod je výrobcem stanovené i specifické nastavení urychlovacího napětí a proudu [50]. Tyto hodnoty ovlivňují nejen samotné spektrum rentgenového záření, ale i velikost a tvar jeho stopy (FS), viz. tabulka umístěná v obrázku 3.3. Tento zdroj může obsahovat i dva různé materiály anod zároveň [50]. Zdroje tohoto typu jsou v literatuře označovány pojmem „dual target source“. Přítomnost dvou materiálů anod v jedné rentgence umožňuje uživateli přístroje, na základě vlastností měřeného vzorku, vybrat vhodnou anodu pro měření. Fyzická výměna materiálu je provedena automaticky na základě softwarového nastavení uživatelem. Na přístroji, kde byly prováděny všechny níže zmíněné experimenty, jsou v rentgence zároveň umístěny anody vyrobené z mědi a molybdenu.



Obr. 3.3: Graf spekter jednotlivých materiálů anody používaných v přístroji Nano 3DX. Tabulka č. 1 udává informace o nastavení přístroje pro každý z materiálů [7].

Vzorek je zde umístěn na rotační platformu umožňující celkem 5 stupňů volnosti (posun ve směru x, y a z, rotace a posun osy rotace). Všechny pohyby jsou

vykonávány s vysokou přesností ($< 0{,}5\,\mu m$) [50]. Na obrázku 3.4 a) je znázorněna geometrie tohoto přístroje. Pro akvizici dat je využíváno mírně rozbíhavého (téměř paralelního) svazku RTG záření. Díky geometrii svazku probíhá akvizice dat pouze v rozmezí 0–180°, jelikož v intervalu 180–360° by data byla pouze zrcadlově převrácená a nepřinesla by žádnou další informaci.



Obr. 3.4: a) Schéma Rigaku Nano 3DX, kde je znázorněn chod téměř paralelního svazku rentgenového záření a systém detekce, skládajícího se ze scintilátoru, soustavy čoček a CCD/CMOS čipu. b) Vizualizace jednotlivých komponent v Nano 3DX [50].

Po průchodu vzorkem dopadá rentgenové záření na scintilační vrstvu, za níž je umístěna zvětšovací (20×) soustava čoček. K Nano 3DX je dostupných celkem pět variant optik, jejichž specifikace jsou uvedeny v tabulce 3.1. Obraz zvětšený optikou je zaznamenáván pomocí detektoru XSigh Micron LC, který může být vybaven CCD nebo CMOS čipem. V této diplomové práci byla používána pouze varianta CCD čipu o rozměrech 3300×2500 pixelů [50]. Ve všech experimentech bylo pro měření využito nastavení *binning* 2, při kterém dochází k sečtení sousedních pixelů. Jeden pixel je tedy v naměřených rentgenových projekcích tvořen čtyřmi reálnými pixely (2×2). Důsledkem tohoto nastavení je na jedné straně zhoršené rozlišení (v případě optiky L0270 z původních $0{,}270\,\mu m$/pixel na $0{,}540\,\mu m$/pixel), na druhé straně dochází k výraznému potlačení šumu a redukci časů měření.

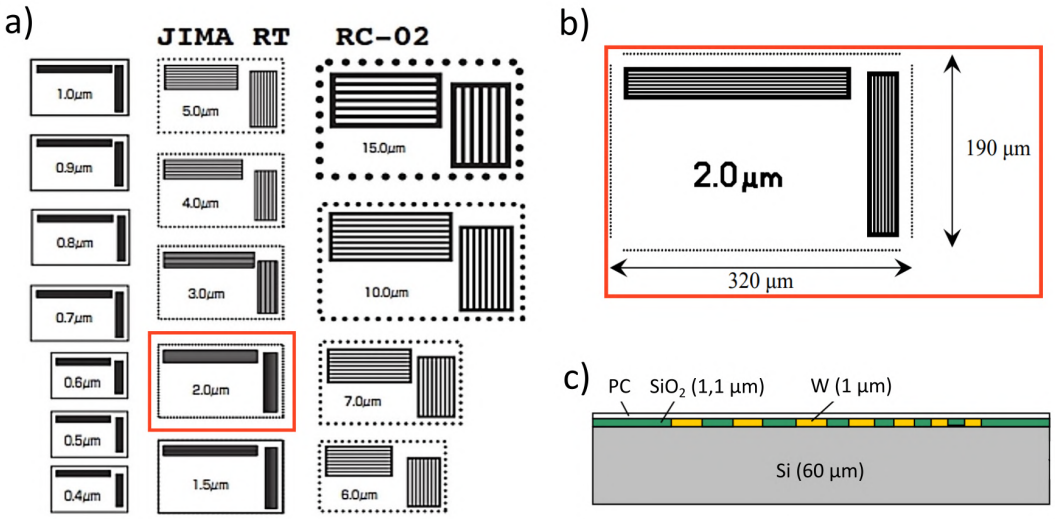
Tab. 3.1: Specifikace velikosti zorného pole a rozlišení pro dostupné optiky.

Název optiky	L0270	L0540	L1080	L2160	L4320
Rozlišení [µm/pixel]	0,270	0,540	1,080	2,160	4,320
Šířka FoV [mm]	0,89	1,78	3.56	7,13	14,26
Výška FoV [mm]	0,68	1,35	2,70	5,40	10,80
Zvětšení	20×	10×	5×	2,5×	1,25×

3.1.1 Prostorové rozlišení

Pro optimalizaci metody volného šíření hraje zcela zásadní roli prostorové rozlišení. Se zvětšující se vzdáleností R_2 (vzorku od detektoru) dochází k jeho postupnému zhoršování. Pro zjištění hodnot tohoto parametru byl pro oba materiály anody proveden experiment s kalibračním nástrojem zvaným *JIMA* [51]. Pro ověření hodnot získaných pouze pro molybdenovou anodu, byl proveden experiment, ve kterém bylo využito kalibračního nástroje Resolution-Spirit od společnosti Cactux [52].

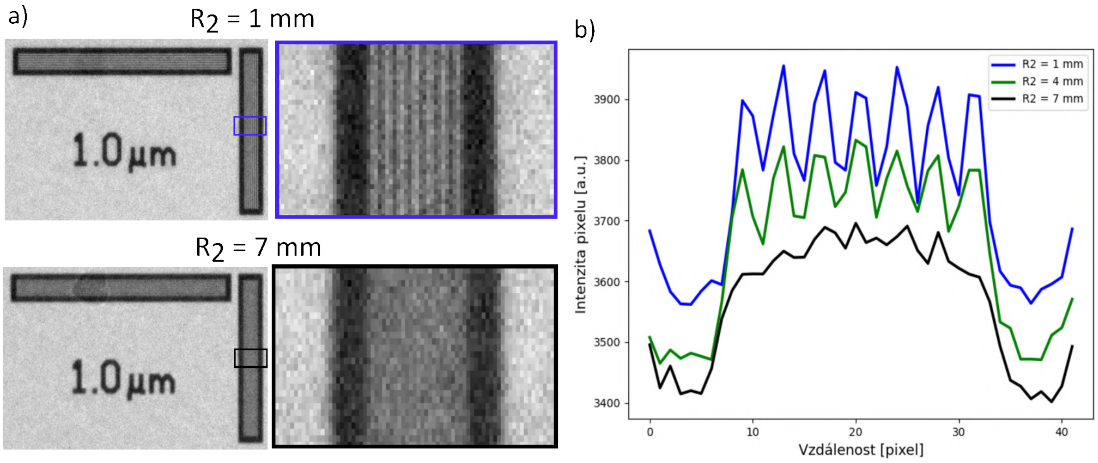
V kalibračním nástroji *JIMA* je umístěna křemíková destička o tloušťce 60 μm obsahující struktury o přesně definovaných rozměrech, které se od sebe odlišují šířkou a vzdáleností mezi jednotlivými čarami. Struktury jsou vyrobeny litografickou metodou střídavě z 1,1 μm silné vrstvy oxidu křemičitého a 1μm vrstvy wolframu. Aby se zabránilo možnému poškození, je na strukturách umístěna ochranná polykarbonátová vrstva. Tento kalibrační nástroj je zobrazen na obrázku 3.5 [51].



Obr. 3.5: a) Náhled na všechny struktury, které *JIMA* obsahuje. b) Detail 2μm struktury. c) Řez litograficky vyrobenou kalibrační destičkou [51].

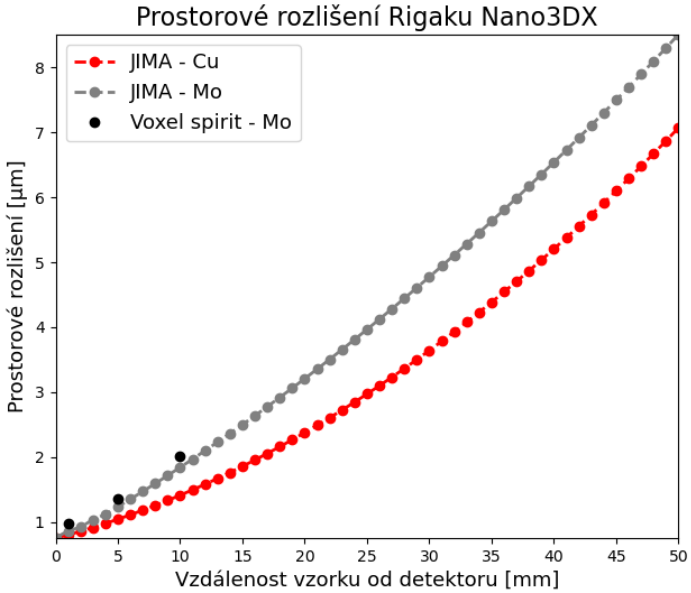
Pro zjištění prostorového rozlišení přístroje Rigaku Nano 3DX, byla postupně zvětšována vzdálenost R_2 mezi kamerou a kalibračním nástrojem, až do vzdálenosti 50 mm (maximální možná vzdálenost) s krokem 1 mm. Se zvětšující se vzdáleností docházelo k rozmazávání jednotlivých struktur (viz obrázek 3.6 a)). Měření tohoto kalibračního nástroje probíhalo s nastavením *binning* 2.

Vyhodnocení rozlišitelnosti jednotlivých struktur bylo provedeno vykreslením liniového profilu. Hodnoty tvořící výsledný liniový profil jsou průměrnými hodnotami deseti sousedních pixelů z jedné vzdálenosti. Ukázka této analýzy je znázorněna na obrázku 3.6 b).



Obr. 3.6: a) Měření mikrometrové struktury ve vzdálenosti 1 a 7 mm od detektoru Cu anodou. b) Liniový profil pro oblast struktury pro tři vzdálenosti od detektoru.

Je zřejmé, že pro zvětšující se vzdálenost od detektoru se výrazně snižuje rozdíl mezi každým lokálním minimem a maximem napříč analyzovanou strukturou. Posun mezi jednotlivými profily je způsoben postupně se snižující intenzitou zaznamenanou detektorem. Naměřené hodnoty pro obě dostupné anody byly zaznamenány do grafu 3.7. Kvůli eliptickému tvaru ohniska, v případě molybdenové anody, byl pozorován rozdíl mezi horizontální a vertikální prostorovou rozlišitelností. Vykreslen byl průběh vertikálního rozlišení, kde byla hodnota prostorového rozlišení vyšší než v případě horizontálního rozlišení.

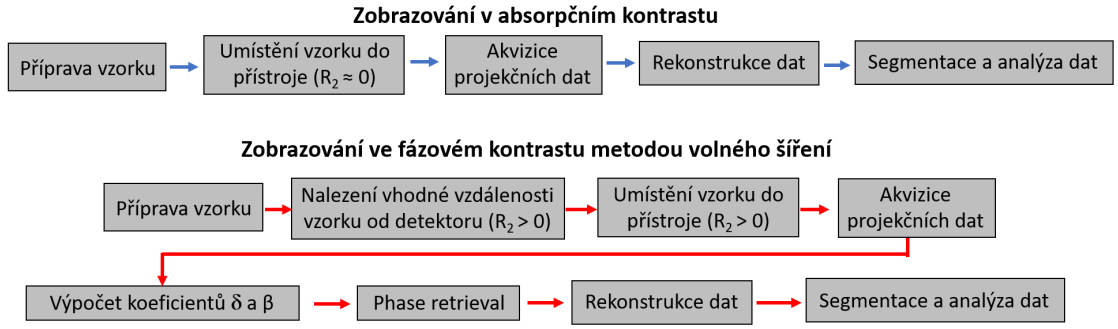


Obr. 3.7: Prostorové rozlišení v přístroji Nano3DX v závislosti na vzdálenosti od detektoru a použité metodě stanovení.

V druhém experimentu bylo využito kalibračního nástroje Resolution-Spirit od společnosti Cactux [52]. Jedná se o vzorek rubínové kuličky o přesně definované velikosti a přesnosti výroby. Pro zjištění hodnoty prostorového rozlišení je provedeno kompletní CT měření. Na zrekonstruovaných CT řezech je výpočetním způsobem tato hodnota určena. Měření proběhlo celkem ve třech vzdálenostech od detektoru ($R_2 = 1\,\text{mm}$, $R_2 = 5\,\text{mm}$ a $R_2 = 10\,\text{mm}$). Pro tato tři měření bylo opět použito nastavení *binning* 2 a molybdenová anoda. Měření tak sloužilo ke korelaci a ověření správnosti hodnot vertikálního rozlišení molybdenové anody z předchozího experimentu. Na grafu 3.7 jsou tyto tři hodnoty zaznamenány. Z grafu je zřejmé, že výsledek obou těchto metod je téměř totožný.

3.1.2 Průběh měření

Celý proces měření na přístroji Rigaku Nano3DX je znázorněn na obrázku 3.8. Ve schématu je názorně vidět rozdíl v celé proceduře mezi měřením v absorpčním a fázovém kontrastu (metodou volného šíření). V obou případech je nejprve nutná příprava vzorku. Rozměr a vlastnosti připraveného vzorku ovlivňují společně s požadovaným rozlišením výběr optiky a materiálu anody, které jsou pro měření použity.



Obr. 3.8: Schéma znázorňující jednotlivé kroky procedury měření v přístroji Rigaku Nano 3DX pro případ absorpčního i fázového zobrazování.

V případě zobrazování ve fázovém kontrastu metodou volného šíření následuje výběr vhodné vzdálenosti vzorku od detektoru. Této problematice je věnována celá sekce 3.3. Poté je zahájena akvizice projekčních dat. Na naměřená data je aplikován algoritmus, jehož výsledkem je odstranění hranového efektu, jenž při měření v optimální vzdálenosti vzniká okolo všech hran, a zvýšení kontrastu mezi jednotlivými strukturami vzorku. Pro správný výsledek je nutné určit hodnotu poměru koeficientů δ a β (viz rovnice 2.6 a 2.7). Takto modifikovaná data jsou následně rekonstruována. Výsledkem rekonstrukce jsou tomografické řezy, na nichž jsou v ideálním případě, jednoduše rozlišitelné vnitřní struktury.

Absorpční a fázová výpočetní tomografie se tedy ve svém postupu odlišuje zejména v těchto dvou krocích: nalezení vhodné vzdálenosti vzorku od detektoru a výpočet jednotlivých částí komplexního indexu lomu pro správné odstranění hranového efektu algoritmem *phase retrieval*. Následující sekce ukazují optimalizaci těchto kroků, která byla v rámci této diplomové práce provedena.

3.2 Parametry pro hodnocení naměřených dat

Tato sekce se postupně věnuje představení parametrů, které budou využívány pro vyhodnocení kvality naměřených dat. Již v předchozích kapitolách bylo zmíněno, že hledání optimální vzdálenosti je ve své podstatě hledání kompromisu mezi zvyšujícím se zvýrazněním hran ve vzorku (hranovým efektem) a zhoršujícím se prostorovým rozlišením. Pro nalezení vzdálenosti, jež tato kritéria splňuje, bude použito čtyř nezávislých parametrů, a sice poměru signálu k šumu, kontrastu na hranách, koeficientu BRISQUE a koeficientu ostrosti obrazu.

Poměr signálu k šumu

Poměr signálu k šumu, dále pouze SNR (z angl. „signal to noise ratio“), je velmi často využívaným parametrem sloužícím ke kvantitativnímu vyjádření kvality obrazu. Obecně existuje několik přístupů, jak parametr SNR vypočítat. Přístupy dělíme na ty založené na zisku informace z jednoho snímku, dvou snímků, a nebo celé série snímků [53].

V případě metody využívající pouze jednoho snímku, je princip založený na výběru dvou oblastí (vzorku (OBJ) a pozadí (BG), viz obrázek 3.9). Kvalitu obrazu poté určujeme pomocí poměru signálu, jenž byl získán v oblasti vzorku a šumu, který se vyskytuje v oblasti pozadí. Hodnotu šumu můžeme získat pomocí směrodatné odchylky pozadí, a nebo střední hodnoty intenzity pozadí. Oběma způsoby lze, při správné parametrizaci, dojít ke stejným výsledkům [53]. V této práci byla využita metoda směrodatné odchylky, kterou můžeme rovněž vyjádřit vztahem 3.1, kde I_{OBJ} značí intenzitu v oblasti vzorku a σI_{BG} označuje směrodatnou odchylku intenzity v oblasti pozadí [48, 53]. Vyšší hodnota SNR poukazuje na vyšší hodnotu kvality obrazu [54].

$$\mathrm{SNR} = \frac{I_{\mathrm{OBJ}}}{\sigma I_{\mathrm{BG}}}. \tag{3.1}$$

Kontrast

Důležitým faktorem při optimalizaci metody volného šíření je rovněž kontrast. Již několikrát bylo zmíněno, že efektem zvyšující se vzdálenosti od detektoru je tzv. haló

efekt, který se postupně vyskytuje kolem všech hran ve vzorku. Tento parametr byl hodnocen na základě manuálního výběru výrazných hran (viz obrázek 3.9). Kontrast lze procentuálně vyjádřit pomocí vztahu 3.2, kde $I_{\max}$ označuje maximální hodnotu intenzity na hraně a $I_{\min}$ první lokální minimum vyskytující se za maximální hodnotou [7, 55]. V případě homogenního vzorku o silné tloušťce a válcovitém tvaru totiž může docházet i k tzv. cupping artefaktu, kdy se hodnota minimální intenzity vyskytuje v místě největšího průměru vzorku. Proto byla hodnota $I_{\min}$ nazvána pouze lokálním minimem.

$$C = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} \cdot 100 \tag{3.2}$$

BRISQUE koeficient

Pro vyhodnocení kvality snímků existuje několik přístupů. Některé, jako například střední kvadratická chyba (MSE z ang. „mean squared error“), špičkový poměr signálu k šumu (PSNR z ang. „peak signal to noise ratio“) nebo SSIM index (z ang. „structural similarity“), jsou založeny na porovnání analyzovaného snímku se snímkem referenčním (ideálním) [56]. V provedených experimentech ovšem možnost mít ideální snímek nebyla, a proto byla využita metrika, která je nereferenční. Jednou z nich je koeficient BRISQUE (zkratka z ang. „blind/referenceless image spatial quality evaluator“) [57].

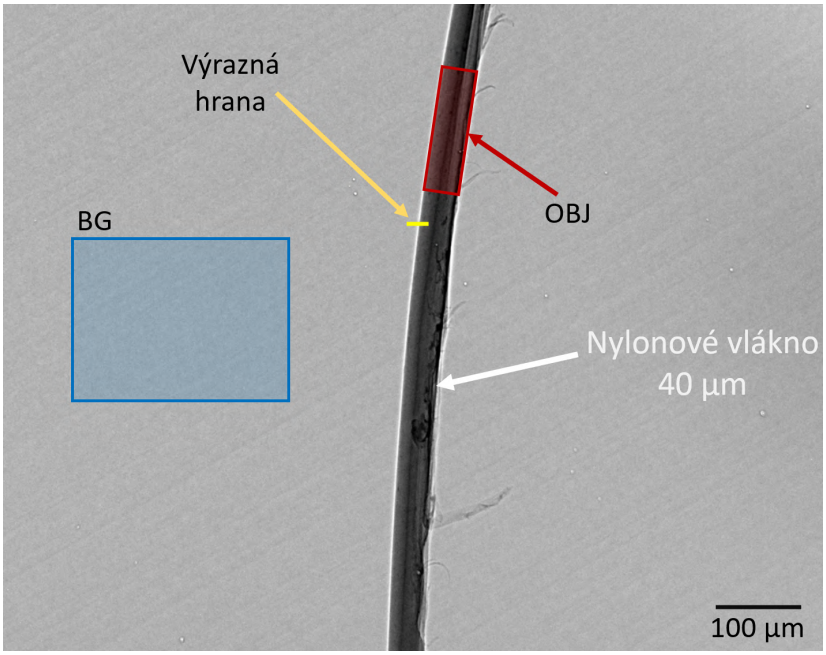
Algoritmus této metriky je založen na regresním vektorovém modelu, který ze znalosti jedné veličiny (vady) odhaduje výskyt jiné veličiny. Tento model byl natrénován na široké databázi ideálních snímků i snímků s vadami [7, 57, 58]. Celkem algoritmus rozpoznává v obraze 17 různých typů vad obrazu, včetně šumu, kontrastu či rozmazání obrazu. Všechny typy těchto distorzí jsou navíc rozděleny do čtyř kategorií na základě jejich intenzity. Jejich kompletní seznam je přehledně uveden v článku Nikolaye Ponomarenka [59]. Výsledkem algoritmu je skóre, jehož hodnoty jsou nejčastěji v rozmezí 0–100. Vyšší skóre znamená horší kvalitu obrazu [60]. Je-li výsledkem 0, je hodnocený parametr bez vad. K vyhodnocení tohoto parametru není nutné vybírat specifickou oblast zájmu. Výsledek tedy udává celkovou kvalitu snímku.

Koeficient ostrosti

Druhou nereferenční metrikou, která byla pro vyhodnocení experimentu použita, je koeficient ostrosti obrazu. Většina algoritmů pro vyhodnocování ostrosti obrazu využívá detekce hran, u kterých jsou poté, na základě počtu pixelů mezi maximem a minimem, hodnoceny jejich tloušťky. Tyto metody výborně fungují na velkých

strukturách, nicméně v případě struktur, které byly měřeny v následujících experimentech, by tato metoda nejspíše nepodávala přesné a spolehlivé výsledky. Z tohoto důvodu je pro vyhodnocení ostrosti obrazu využit parametr popsaný v článku prof. Jayanta Kumara [61].

Místo hodnocení šířky hrany se zde vyhodnocují postupné změny ve stupních šedi. Celý algoritmus je sepsaný v knihovně ΔDoM, která je jednoduše implementovatelná například do prostředí programovacího jazyku Python. Nejprve je na vyhodnocovaný snímek aplikován mediánový filtr, aby byly potlačeny změny způsobené šumem [61]. Poté se v horizontálním a následně ve vertikálním směru vyhodnocují rozdíly v rozdílech hodnot šedé v daném směru. Jestliže se rozdíly rychle mění, algoritmus vyhodnotí snímek jako ostrý a naopak. Tento algoritmus byl původně koncipován na hodnocení textových dokumentů, následně byl ovšem rozšířen na libovolné snímky např. snímky krajin [61].



Obr. 3.9: Rentgenová projekce nylonového vlákna o průměru 40 μm, na němž jsou vyznačeny oblasti, na nichž byly vyhodnocovány parametry poměr signálu k šumu (SNR) a kontrastu na výrazné hraně (C).

3.3 Výběr optimální pozice pro měření vzorku

Tato sekce popisuje hlavní cíl práce, a sice metodiku pro nalezení optimální pozice pro měření vzorku metodou volného šíření. Jsou zde popsány experimenty a dosažené výsledky, které k vytvoření výsledné metodiky vedly. Práce navazuje na Ing. Dominiku Kalasovou, Ph.D, která ve své disertační práci prokázala, že je pro měření ve fázovém kontrastu přijatelné, aby byl měřený vzorek umístěn i do větší vzdálenosti od detektoru, než je vzdálenost vyplývající ze vztahů 2.12 a 2.13. V případě měděné anody je tato teoretická vzdálenost přibližně 2 mm. Pro molybdenovou anodu poté pouhý 1 mm, kvůli větší velikosti FS.

Pro experimenty byla využita syntetická vlákna. Konkrétně se pak jedná o nylonová, polypropylenová (PP) a polyesterová vlákna (PE) o přesně definovaných průměrech. Z pohledu výpočetní tomografie se jedná o materiály s nízkou hustotou, při jejichž měření je relativně obtížné dosáhnout dostatečného absorpčního kontrastu.

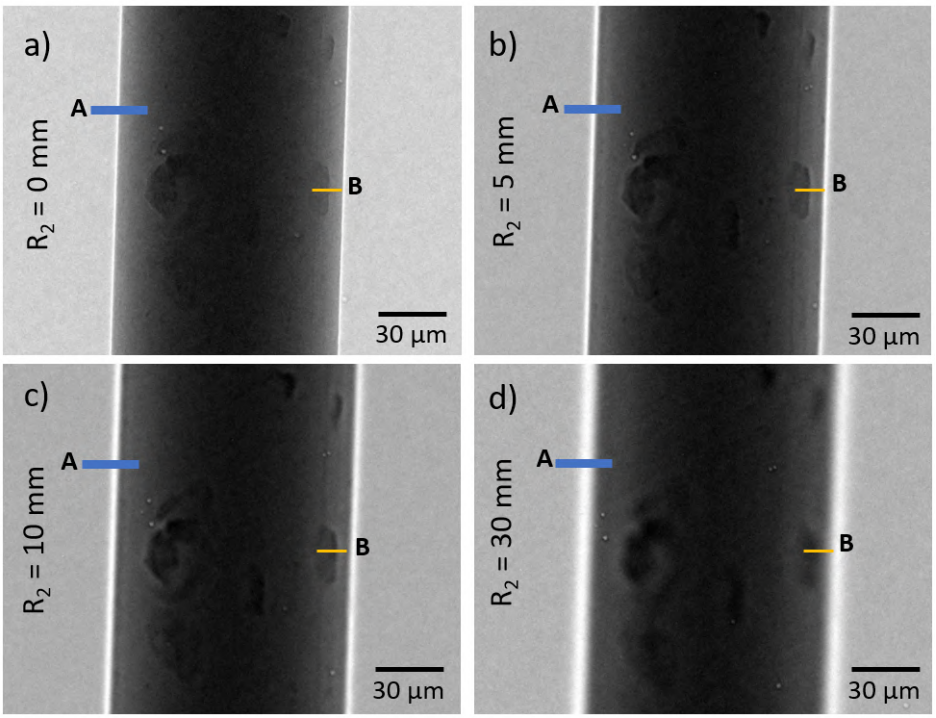
Ověření teoretických předpokladů

K prvnímu experimentu bylo využito nylonové vlákno o průměru 100 μm. Vlákno bylo postupně naměřeno ve vzdálenostech $R_2 = 0$–50 mm (maximální hodnota, do které lze detektor přístroje posunout) s krokem 1 mm. Geometrie přístroje Nano 3DX je navržena tak, že i v maximální vzdálenosti od detektoru je splněna podmínka blízkého pole. Nutno poznamenat, že vzdálenost R_2 v přístroji Rigaku Nano 3DX označuje vzdálenost vzorku od detektoru v souřadnicovém systému tohoto přístroje, která je o přibližně o 2,5 mm větší, než je reálná vzdálenost. Jedná se o bezpečnostní prvek, který předchází případnému kontaktu vzorku s detektorem, jenž by mohl detektor poškodit. Projekce nylonového vlákna z pozic $R_2 = 0; 5; 10; 30$ mm jsou znázorněny na obrázku 3.10.

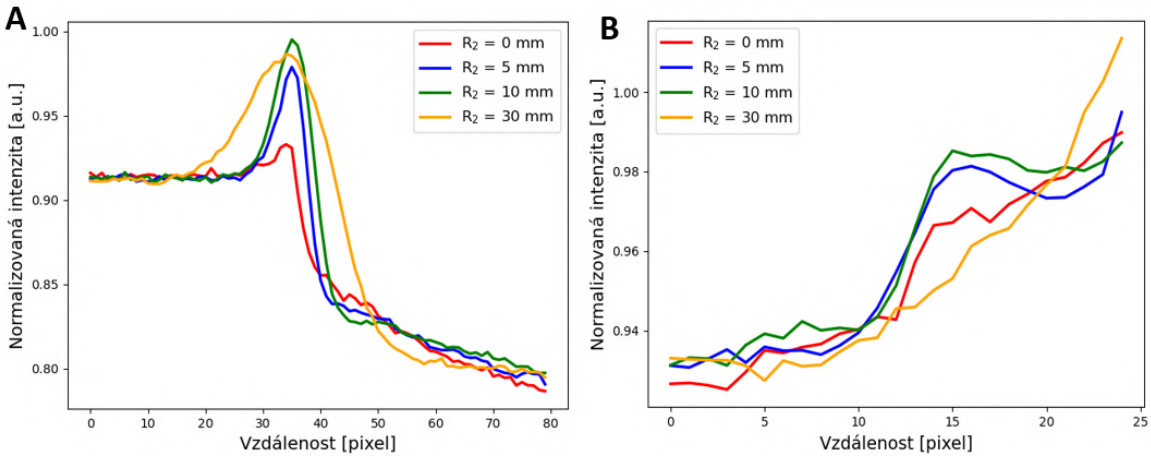
Na obrázku 3.10 je všech hranách ve vzorku pozorovatelný „haló“ efekt na, ke kterému docházelo se zvětšující se vzdáleností od detektoru. Nejlépe je tento jev viditelný na vnější hraně nylonového vlákna, kde se v malé formě projevuje i pro vzdálenost $R_2 = 0$ mm. To dokazuje skutečnost, že vzorek při umístění do této pozice neleží přímo v rovině detektoru, jak již bylo avizováno výše.

Je patrné, že dochází ke zvyšování dosaženého kontrastu, ale zároveň jsou vnitřní struktury postupně rozmazávány. Pro lepší znázornění byly vykresleny liniové profily přes vnější hranu (viz obrázek 3.10 – modrá úsečka A) a přes vybranou vnitřní strukturu (viz obrázek 3.10 – žlutá úsečka B). Hodnoty, které tvoří grafy těchto profilů jsou opět průměrem z deseti sousedních pixelů v dané vzdálenosti. Tyto profily jsou znázorněny na obrázku 3.11. Vidíme, že nejprve dochází k výraznému zvýšení kontrastu (větší rozdíl intenzit mezi maximem a lokálním minimem křivky), následně je ale ve vzdálenosti 30 mm je šířka této hrany, v porovnání s ostatními

pozicemi, mnohem větší. To znamená, že došlo k jejímu rozmazání. Na obrázku 3.11 B vidíme, že vnitřní struktura je rozmazaná natolik, že v profilu již není vůbec rozeznatelná.



Obr. 3.10: Projekce nylonového vlákna o průměru 100 μm naměřené ve vzdálenostech ve čtyřech různých vzdálenostech od detektoru (R_2). Modré a žluté linky vyznačují oblasti vnější a vnitřní hrany, na kterých byl vykreslen liniový profil (viz obrázek 3.11).

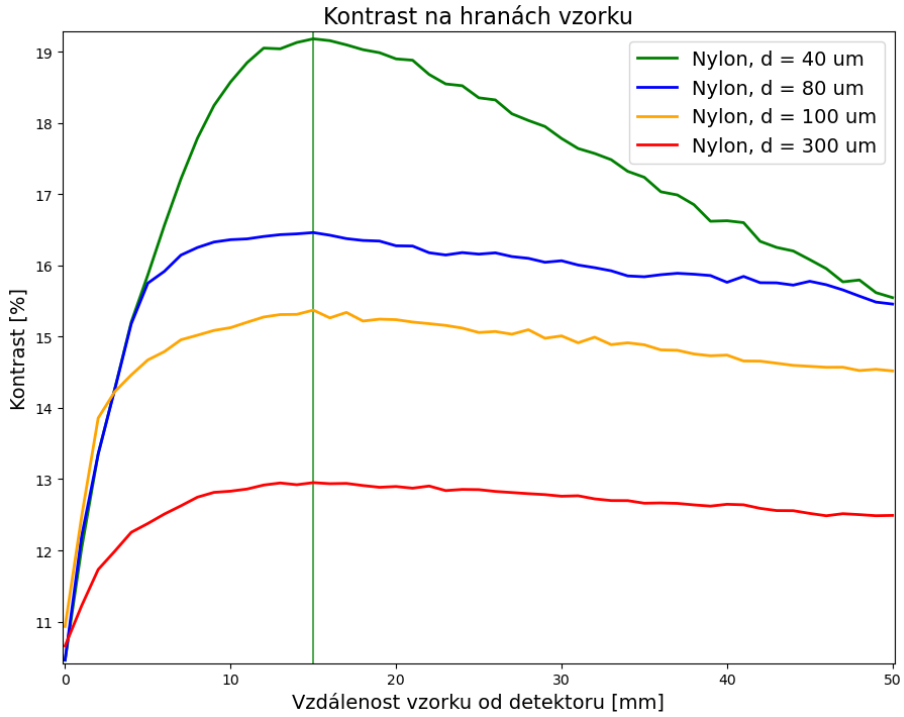


Obr. 3.11: A: Liniový profil na vnější hranu nylonového vlákna pro čtyři různé vzdálenosti od detektoru. B: Liniový profil na vnitřní struktuře nylonového vlákna.

Tímto experimentem tak byly dokázány teoretické předpoklady, které byly popsány v teoretické části práce, zejména pak v sekci 2.2.4.

Vývoj kontrastu na hranách vzorku

Po ověření teoretických předpokladů následoval experiment, jehož cílem bylo zjistit, jakým způsobem se vyvíjí hodnota kontrastu na hranách, v závislosti na velikosti vzorku. Pro tento experiment byla použita nylonová vlákna o průměrech 40, 80, 100 a 300 μm. Vlákna byla, stejně jako v předchozím případě, měřena ve vzdálenostech $R_2 = 0$–50 mm od detektoru s krokem 1 mm. V rámci analýzy byl pro všechna měření vyhodnocen kontrast na základě vztahu 3.2. Ve všech případech byla pro analýzu vybrána stejná oblast vzorku, a sice výrazná vnější hrana. Graf závislosti kontrastu na vzdálenosti od detektoru je pro tato čtyři nylonová vlákna zobrazen na obrázku 3.12.



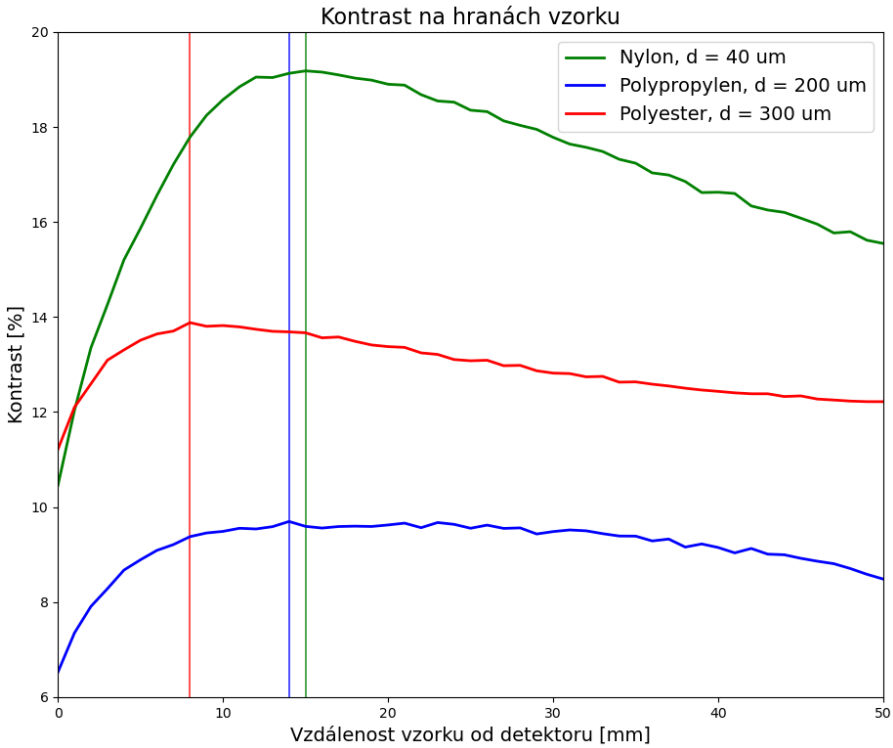
Obr. 3.12: Graf závislosti hodnoty kontrastu na vzdálenosti nylonového vlákna od detektoru pro čtyři průměry vláken. Svislá čára v grafu vyznačuje maximální hodnotu kontrastu.

Z tohoto grafu je zřejmé, že tato závislost nabývá ve všech případech maximální hodnoty. Od této hodnoty poté úroveň kontrastu klesá. Tento projev je nejvíce zřetelný v případě nylonového vlákna o průměru 40 μm, kdy nejprve dojde k navýšení kontrastu z 10,5 % na 19,2 %, a poté tato hodnota postupně klesá až na hodnotu 15,6 %. V případě nylonových vláken nastává maximum vždy ve vzdálenosti 15 mm

od detektoru. Na základě analýzy vývoje kontrastu na hraně vzorku bylo dosaženo tří závěrů.

1. Kontrast na hraně vzorku vždy nabývá maxima a poté jeho hodnota klesá.
2. Pro tentýž materiál je vzdálenost, ve které nastává maximální kontrast, stejná.
3. Hodnota maximálního kontrastu je vyšší se snižujícím se průměrem vzorku.

V následujícím kroku byl proveden stejný experiment, ovšem pro jiné materiály vláken. Vzorky pro tento pokus byly vytvořeny z polypropylenového vlákna o průměru 200 μm a polyesterového vlákna s průměrem 300 μm. Byla provedena naprosto stejná analýza jako v případě nylonových vláken. Graf závislosti hodnoty kontrastu je znázorněn na obrázku 3.13.



Obr. 3.13: Graf závislosti kontrastu na vzdálenosti od detektoru pro tři různé průměry a materiály vláken. Svislé čáry v grafu vyznačují maximální hodnoty kontrastu.

Z tohoto grafu je patrné, že hodnota kontrastu na hraně nezáleží pouze na rozměru vzorku, ale i na jeho materiálu. Pro porovnání různých materiálů byl do grafu vložen i výsledek analýzy 40μm nylonového vlákna. Z provedeného experimentu vyplývá, že pro různé materiály je pozice maximálního kontrastu různá. Na tomto grafu si můžeme povšimnout, že i přes menší průměr polypropylenového vlákna bylo dosaženo menšího kontrastu na hraně, než v případě polyesterového vlákna, jehož rozměr byl o 100 μm větší.

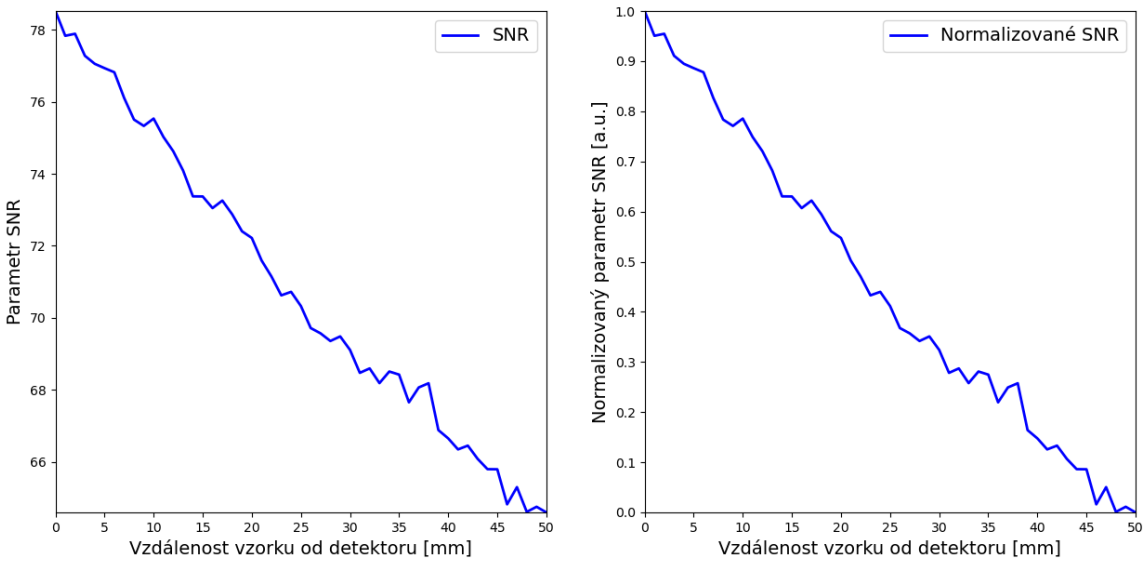
Výpočet skóre určujícího optimální pozici

Zvýšení kontrastu, jež bylo popsáno v předchozí podsekci, je ovšem pouze jedním z faktorů, určujících výběr optimální pozice. Následně tak pro každou získanou projekci byly vyhodnoceny i parametry SNR, BRISQUE a parametr ostrosti.

K výběru ideální pozice od detektoru bylo nadále přistoupeno výpočtem celkového skóre z těchto parametrů. Do skóre byl započítán i parametr prostorového rozlišení. Ještě předtím, než bylo možné parametry porovnávat, bylo nutné jejich hodnoty normalizovat. Vzhledem k distribucím naměřených dat a k požadavkům na výstupní hodnoty byl vybrán způsob min–max normalizace. Všechny naměřené a vypočítané hodnoty tak byly normalizovány vztahem [62]

$$x' = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} + x_{\min}}. \tag{3.3}$$

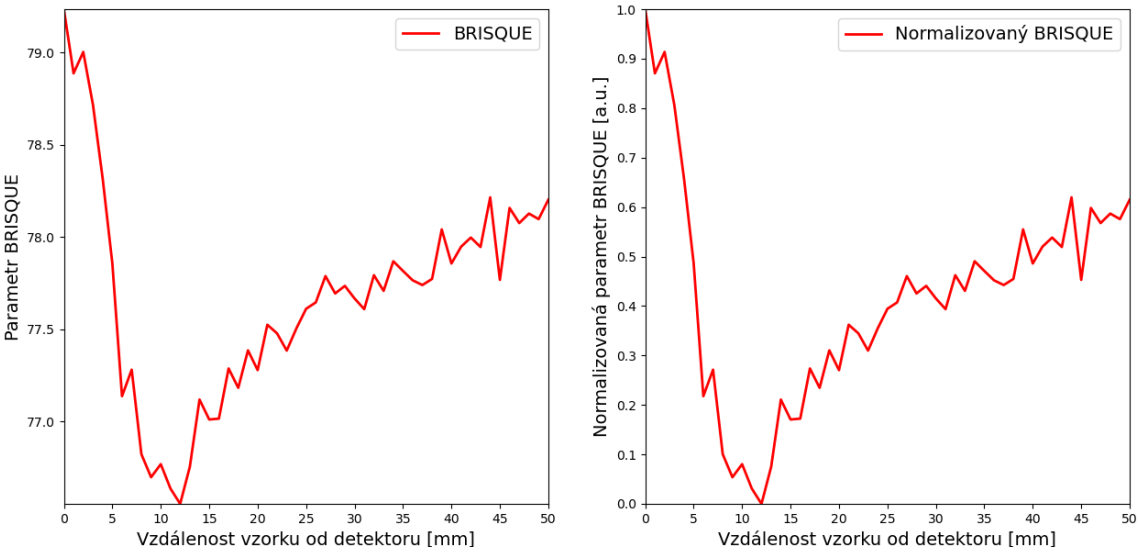
Veličina x' ve vztahu 3.3 označuje normalizovanou hodnotu daného parametru. Na následujících obrázcích jsou grafy znázorňující jednotlivé vypočítané parametry pro vzorek nylonového vlákna o průměru 40 μm (viz obrázek 3.9). Rovněž je nyní nutné poznamenat, že u některých parametrů, jako je například SNR, znamená vyšší hodnota lepší kvalitu (modrá barva grafu). Naopak v případě prostorového rozlišení či parametru BRISQUE jsou nejlepšími hodnotami ty nejnižší (červená barva grafu).



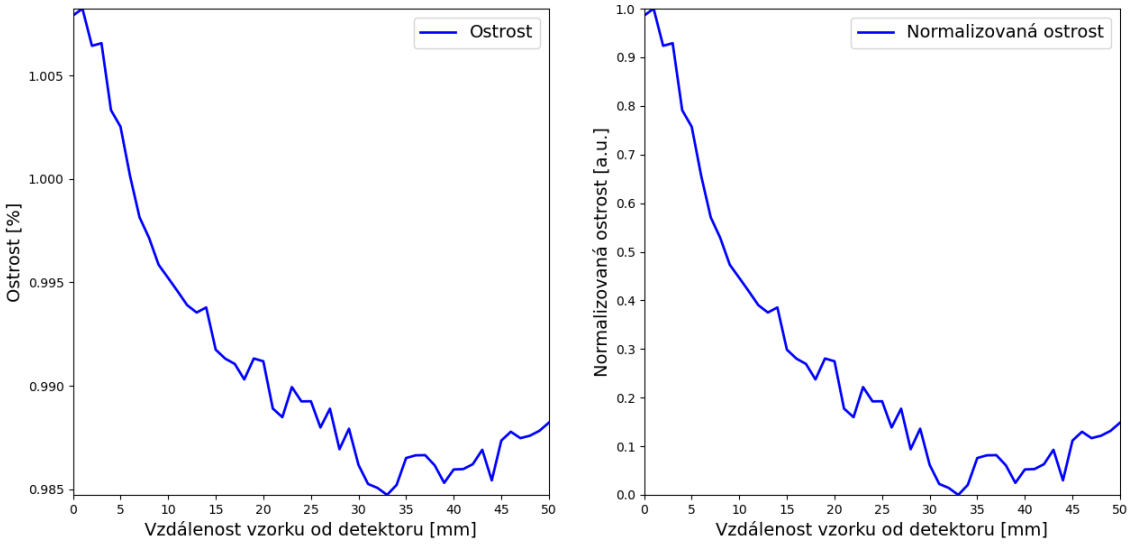
Obr. 3.14: Normalizace parametru SNR z projekcí 40μm nylonového vlákna.

Parametr SNR vyjadřuje poměr signálu a šumu. S rostoucí vzdáleností od detektoru dochází k postupnému rozmazávaní obrazu a zároveň se snižuje míra šumu. Jelikož je na obrázku 3.14 evidentní klesající tendence tohoto poměru, znamená to, že množství detekovaného signálu klesá výrazněji, než úroveň šumu.

Na obrázku 3.15 je graf znázorňující vývoj parametru BRISQUE. Na základě výsledků tohoto parametru je nejkvalitnějším snímkem projekce naměřená v pozici $R_2 = 12\,\text{mm}$. Nejhoršími snímky jsou pak projekce naměřené v blízkosti detektoru, a to zejména kvůli nedostatečnému kontrastu a relativně velkému množství šumu, který se v těchto projekcích vyskytuje. Jelikož se tyto dva parametry postupně vylepšují, dochází k poklesu i v hodnotách parametru BRISQUE. Následný nárůst v jeho hodnotách je poté způsoben postupným rozmazáváním hran a snižováním kontrastu (viz 3.18).



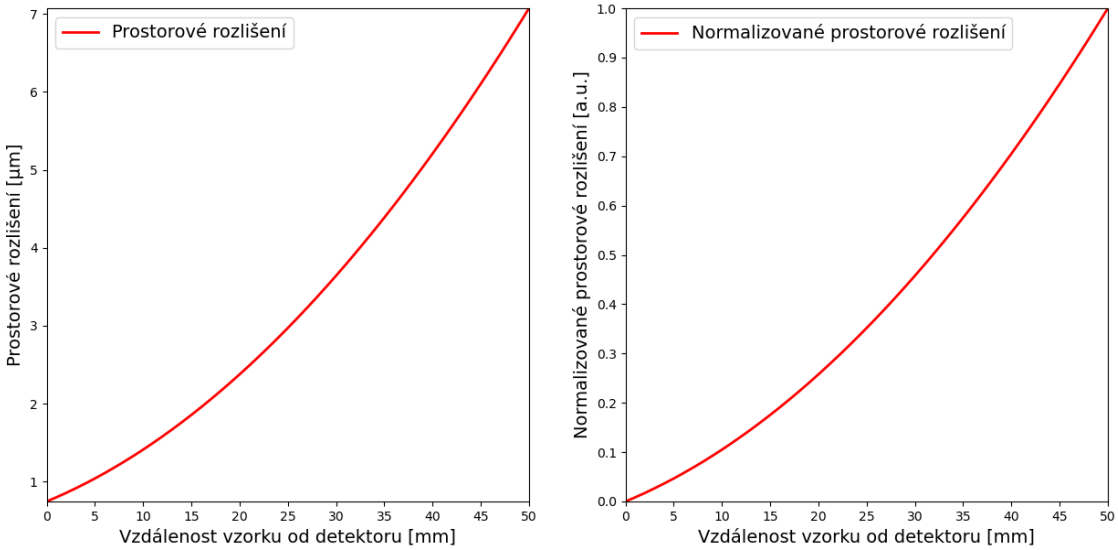
Obr. 3.15: Normalizace parametru BRISQUE v projekcích 40μm nylonového vlákna.



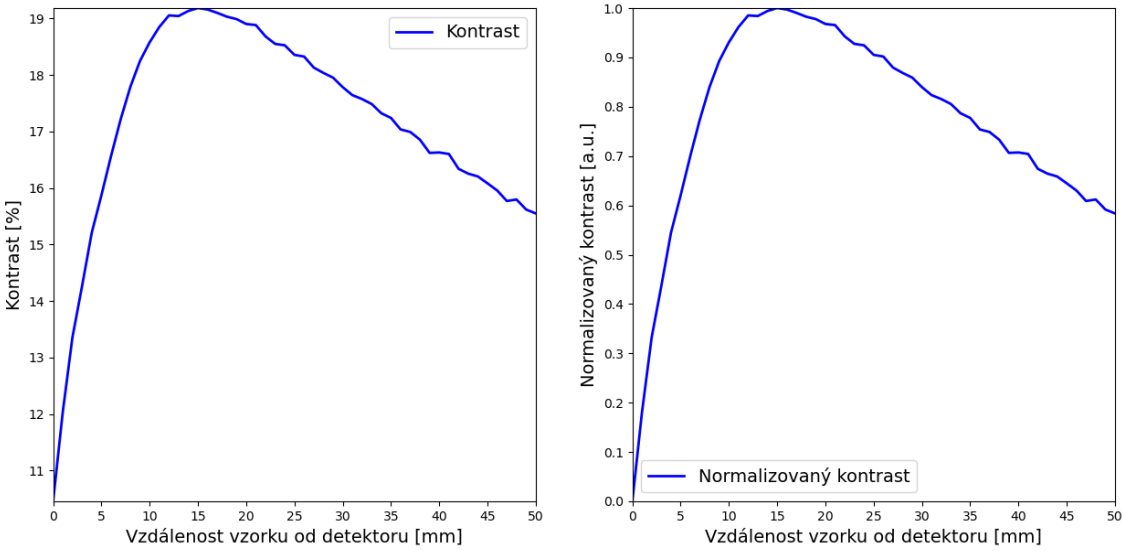
Obr. 3.16: Normalizace parametru ostrosti v projekcích 40μm nylonového vlákna.

Obrázek 3.16 znázorňuje vývoj parametru ostrosti v naměřených projekcích. Vidíme, že i ten dokazuje postupné rozostřování obrazu. Do hodnoty $R_2 = 15\,\text{mm}$ je

graf velmi jednoznačný a křivka znázorňující vývoj tohoto parametru je relativně hladká. Od této hodnoty dochází v jednotlivých projekcích k mírným odchylkám v tomto parametru. Minimum navíc překvapivě nenastává ve vzdálenosti $R_2 = 50\,\text{mm}$. Tento jev je pravděpodobně způsoben tím, že jsou vnitřní struktury již natolik rozmazané, že je algoritmus počítající tento koeficient, vůbec jako hrany nevyhodnotí. Z toho důvodu začne parametr od hodnoty $R_2 = 33\,\text{mm}$ mírně stoupat.



Obr. 3.17: Normalizace parametru prostorového rozlišení Cu anody.



Obr. 3.18: Normalizace parametru kontrastu na hraně 40μm nylonového vlákna.

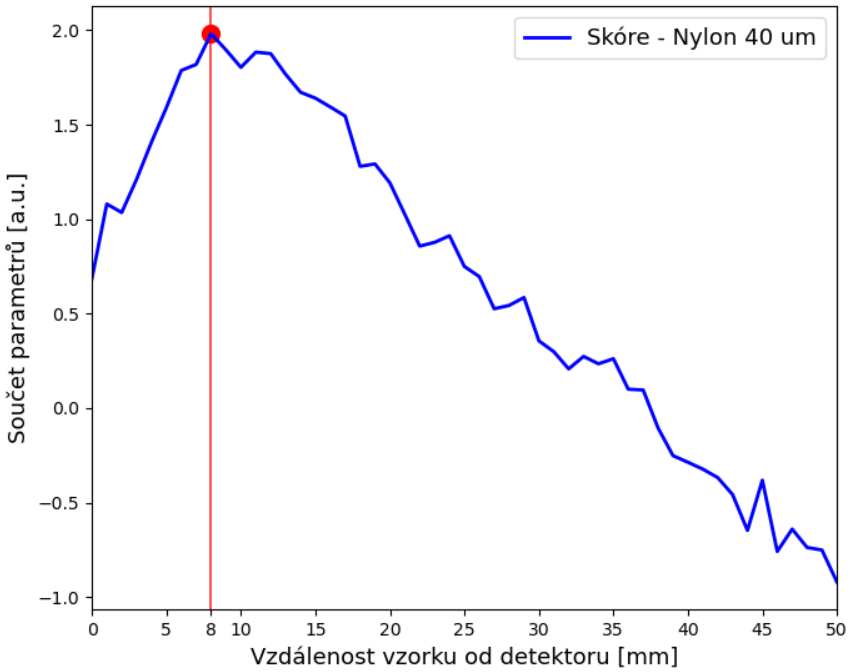
Na obrázku 3.17 a 3.18 je znázorněna normalizace parametru prostorového rozlišení měděné anody a kontrastu na vnější hraně 40μm nylonového vlákna. Grafy

původních hodnot těchto parametrů před min-max normalizací již byly znázorněny a okomentovány výše.

Jelikož mají všechny parametry nyní stejný rozměr, je možné je mezi sebou vzájemně porovnávat. Jsme tak schopni vypočítat optimální pozici pro měření tohoto vzorku. Vztah pro výpočet je explicitně vyjádřen následovně:

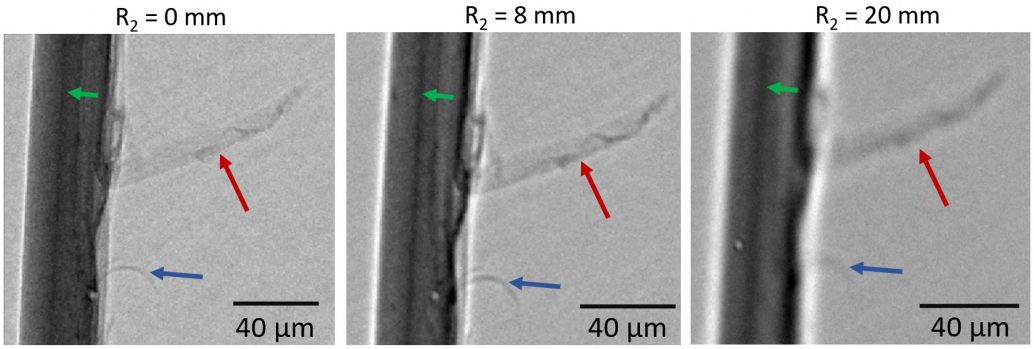
$$\text{Skóre} = \text{SNR} + C + Sh - SR - \text{BRISQUE}, \tag{3.4}$$

kde Sh označuje parametr ostrosti (z ang. „Sharpness“) a SR (z ang. „Spatial resolution“) vyjadřuje parametr experimentálně určeného prostorového rozlišení. Na obrázku 3.19 je znázorněno výsledné skóre pro nylonové vlákno o průměru 40 μm. Vidíme, že maximální hodnoty skóre bylo dosaženo ve vzdálenosti $R_2 = 8$ mm. Z grafu je patrné, že hodnota skóre nejprve prudce stoupá až do maximální hodnoty, poté dochází k postupnému poklesu až do záporných hodnot.



Obr. 3.19: Určení optimální pozice pro měření nylonového vlákna o průměru 40 μm metodou volného šíření.

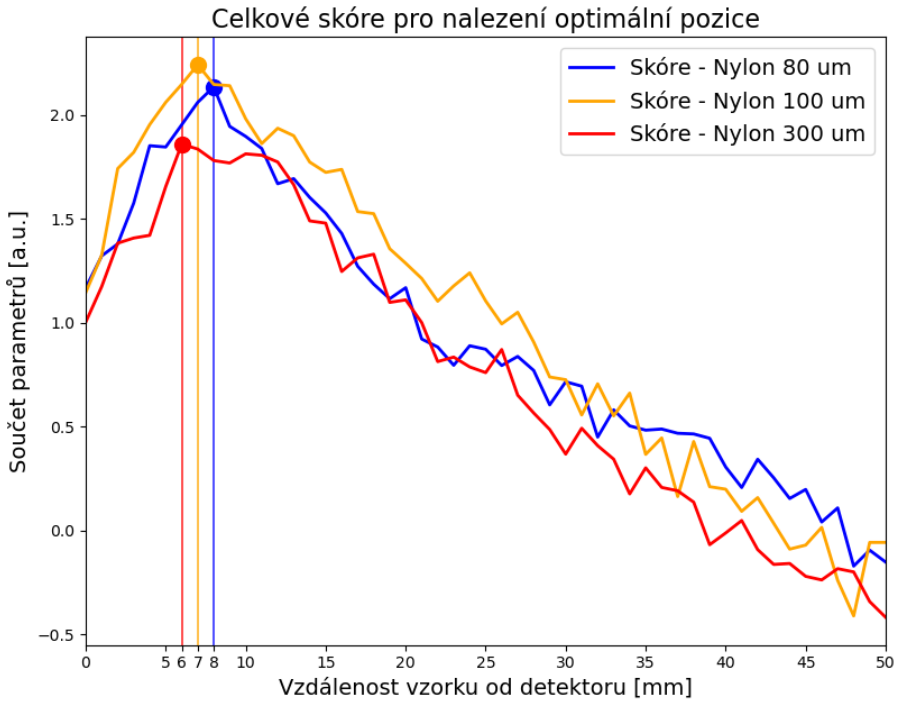
Na základě těchto pěti vybraných parametrů byla pro vzorek zvolena optimální pozice. Na obrázku 3.20 je znázorněno srovnání projekce vlákna v pozici absorpčního zobrazování, vybrané ideální pozici a pozici, která je již od detektoru příliš vzdálená. Pomocí šipek jsou na projekcích vybrána tři místa, kde je efekt nejvíce zřetelný. Oddálením vzorku do ideální pozice došlo k výraznému navýšení kontrastu na strukturách, které byly v pozici $R_2 = 0$ mm velmi těžce rozeznatelné. Naopak v případě umístění vzorku příliš daleko od detektoru, je obraz velmi rozmazaný.



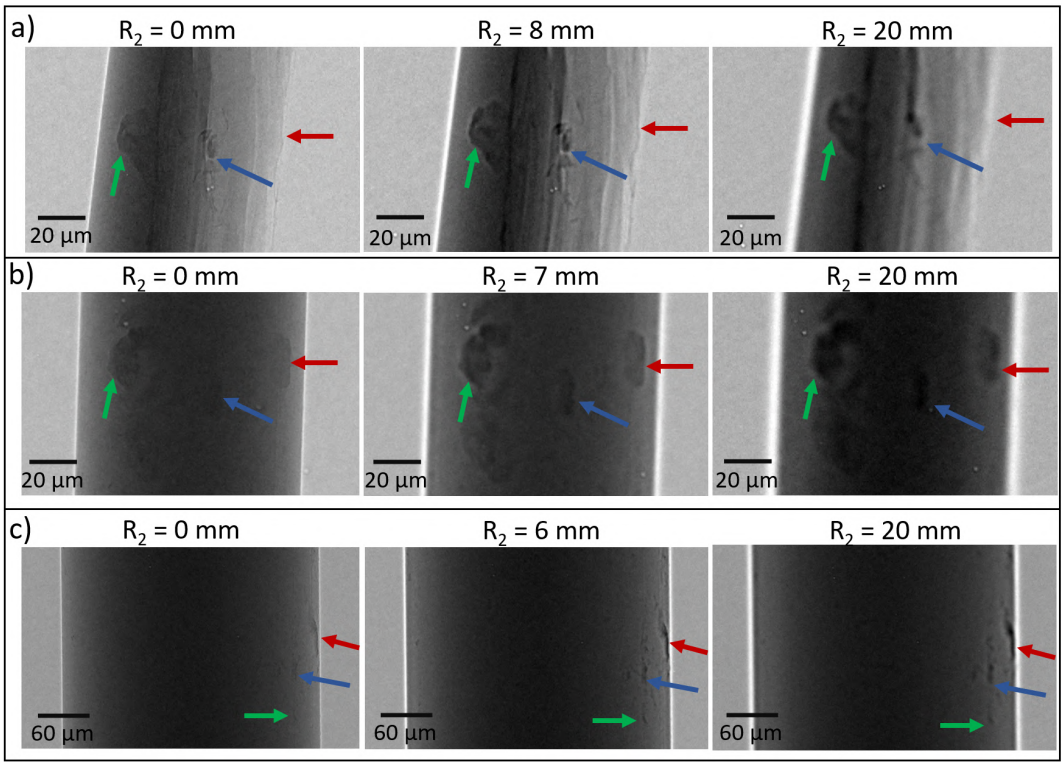
Obr. 3.20: Srovnání projekce 40μm nylonového vlákna ve vypočítané optimální vzdálenosti (8 mm), se vzdálenostmi 0 a 20 mm od detektoru.

Stejná analýza byla následně provedena i pro ostatní již výše zmiňovaná naměřená vlákna. Na obrázku 3.21 je znázorněn graf vypočítaných skóre pro ostatní nylonová vlákna. Vidíme, že pro každé z těchto vláken byla optimální pozice jiná.

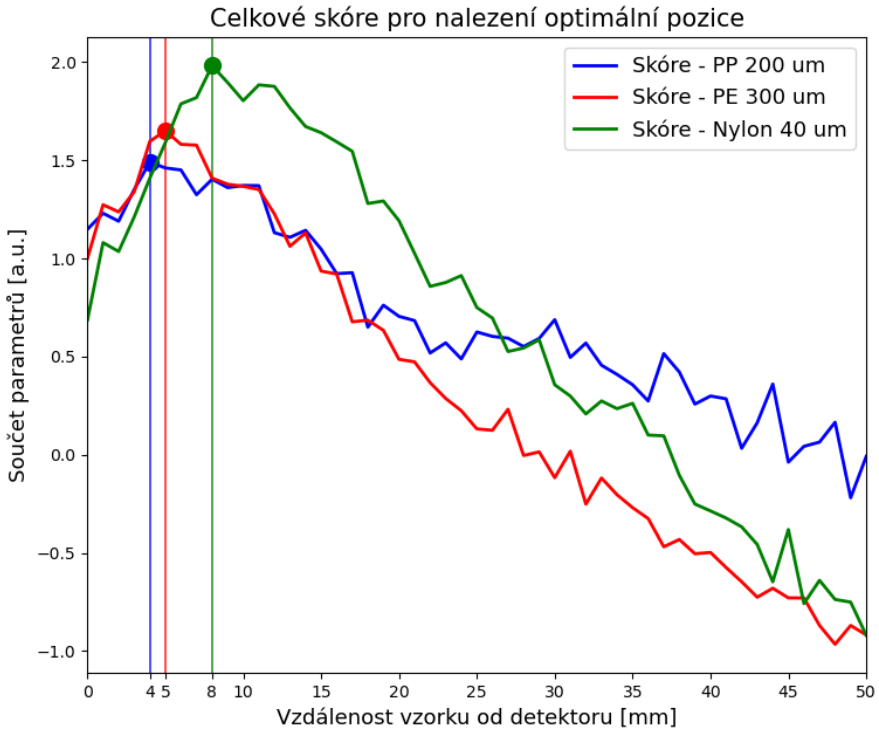
Projev větší vzdálenosti v jednotlivých projekcích je však ve všech případech stejný. Je možné si povšimnout, že pozice pro měření vzorku koresponduje pro každé z vláken s grafem 3.12. Například v případě 300μm nylonového vlákna nedošlo k výraznému navýšení kontrastu, a proto je jeho ideální pozice nejblíže detektoru. Na obrázku 3.22 jsou pro srovnání zobrazeny 3 vybrané projekce zmiňovaných vláken.



Obr. 3.21: Optimální pozice pro měření nylonových vláken s různými průměry.

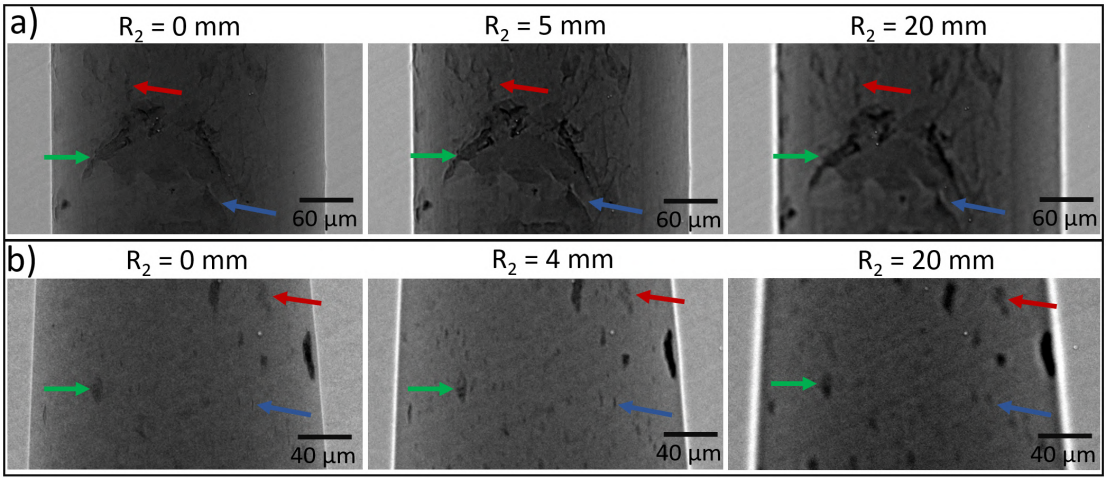


Obr. 3.22: Srovnání projekcí a) 80μm, b) 100μm a c) 300μm vlákna.



Obr. 3.23: Výsledné skóre pro materiály PP a PE a 40μm nylonové vlákno.

Obrázky 3.23 a 3.24 znázorňují výsledky stejné analýzy, ovšem pro jiné materiály. Vidíme, že vzorky těchto materiálů jsou od sebe svoji strukturou velmi odlišné. I u těchto materiálů byl projev větší vzdálenosti od detektoru totožný, jako u nylonových vláken. Všechny ukázky projekcí, které byly v této sekci znázorněny vznikly průměrem původních pěti projekcí. Bez průměrování by ukázkové snímky obsahovaly větší množství šumu. Tento postup byl tedy aplikován pouze se záměrem jeho redukce. Interpretace a ukázka dosažených výsledků tak byla jednodušší a jednoznačnější.



Obr. 3.24: Srovnání optimální projekce a)PE a b) PP materiálu se vzdáleností 0 a 20 mm.

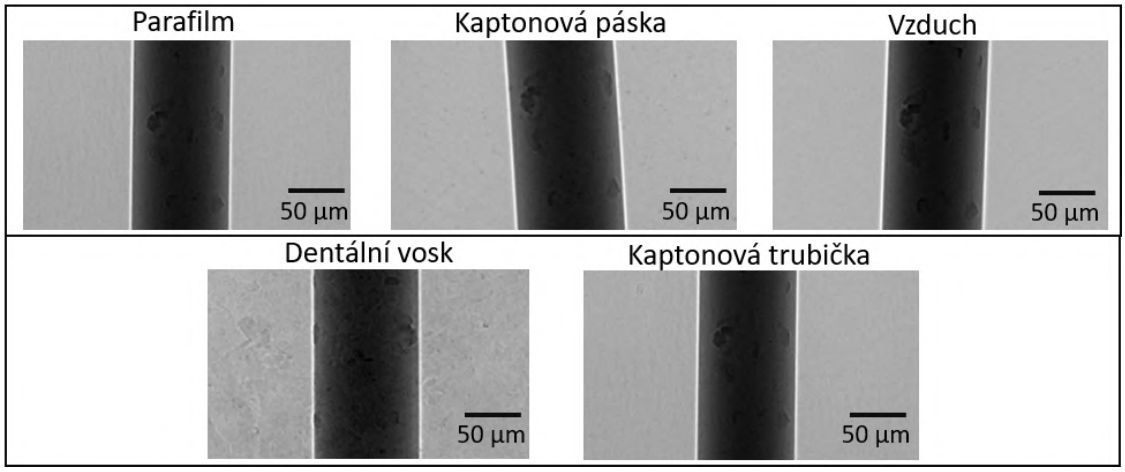
Díky těmto experimentům se potvrdily teoretické předpoklady. Navíc jsme dokázali najít způsob vyhodnocení optimální pozice pro měření vzorku ve fázovém kontrastu metodou volného šíření. Na projekcích všech vzorků bylo pozorovatelné, že vzorky obecně obsahují velké množství od sebe odlišných vnitřních struktur (tvar, velikost, útlumový koeficient). Není tedy vhodné hledat optimální pozici pro měření vzorků teoretickými výpočty, nýbrž takto experimentálně.

Z důvodu zhoršujícího se prostorového rozlišení přístroje Rigaku Nano 3DX se zvyšující se vzdáleností od detektoru, se dále v praktické aplikaci této metodiky omezíme na hledání ideální pozice pouze v rozsahu R_2 =0–15 mm. Aby tato metodika byla aplikovatelná a uživatelsky přijatelná, byl v ovládacím prostředí pro přístroj Rigaku Nano 3DX vytvořen skript, který potřebná měření provede automaticky. Pro zpracování byl v programovacím jazyce Python vytvořen skript. Ten po výběru oblastí BG, OBJ a hrany, provede výpočet všech koeficientů, jejich normalizaci a výpočet celkového skóre. Ukázka praktické aplikace na dvou vybraných vzorcích je popsána v sekci 3.5.

3.3.1 Vliv přípravy vzorku na fázový kontrast

V předchozí sekci byla vytvořena metodika, na základě které je možné nalézt optimální pozici pro měření vzorku. Její tvorba ovšem proběhla na vzorcích, jež bylo možné připravit tak, že měřená okolo sebe neměla žádný materiál. Dosavadní vzorky tak v měřené oblasti byly v kontaktu pouze s okolním vzduchem.

V reálných aplikacích často není možné této konfigurace dosáhnout. Obvykle je totiž nutné externím materiálem vzorek připevnit k držáku tak, abychom zamezili jeho pohybu v průběhu měření. Způsob fixace vzorku je velmi specifický pro každý z nich. Volba externího materiálu tak závisí zejména na tvaru a kompozici měřeného objektu. Okolní materiál musí vzorek na jednu stranu dostatečně upevnit, zároveň však příliš neovlivňovat kvalitu měření. V této práci tak byly vybrány čtyři nejčastěji používané materiály, které se k přípravě vzorků využívají. Jmenovitě se jedná o parafilm, kaptonovou trubičku, kaptonovou lepící pásku a dentální vosk. Pro experimentální ověření vlivu okolního materiálu, bylo využito nylonové vlákno o průměru 100 μm. Okolo vlákna se poté umístil jeden z vybraných fixačních materiálů. Následně byl vzorek upevněn do jeho optimální pozice, tedy do vzdálenosti $R_2 = 7\,\mathrm{mm}$.



Obr. 3.25: Rentgenové projekce 100μm nylonového vlákna připevněného na držák různými fixačními materiály.

Stejně jako v předchozí podkapitole, byla vždy naměřena sekvence pěti projekcí, která byla zprůměrována. Ukázka vzniklých snímků je na obrázku 3.25 znázorněna. Následně byly vyhodnoceny parametry SNR, BRISQUE, ostrosti a kontrastu. Vypočtené hodnoty jsou zapsány v tabulce 3.2.

Použité fixační materiály jsou na základě celkového skóre kvantifikovány. Podle předpokladů bylo nejlepší skóre dosaženo u vzorku bez okolního materiálu. Nicméně

z použitých materiálů bylo nejvyšší skóre dosaženo pomocí kaptonové trubičky. Následoval parafilm, kaptonová páska a dentální vosk. Z důvodu stejné vzdálenosti vzorku od detektoru nebylo do výpočtu zahrnuto prostorové rozlišení. Kontrolně bylo toto skóre spočítáno i pomocí normalizovaných parametrů. Zmíněné pořadí materiálů zůstalo stejné. Tento experiment určil pomocí jakého fixačního materiálu je vhodné připravit vzorek, aby byl efekt fázového kontrastu co nejméně ovlivněn. Výsledky experimentu jsou důležité zejména v případech, kdy je možné vzorek připravit pomocí dvou a více zmíněných fixačních materiálů.

Tab. 3.2: Vyhodnocení parametrů SNR, BRISQUE, ostrosti a kontrastu pro vzorek připravený různými fixačními materiály. Vyšší skóre určuje vhodnější fixační materiál, který méně ovlivní výsledek měření.

	SNR	**BRISQUE**	**Ostrost**	**C**	**Skóre**
Parafilm	112,80	74,46	0,42	13,96	52,72
Kaptonová trubička	117,43	66,46	0,39	13,21	64,57
Kaptonová páska	104,56	67,30	0,38	13,43	51,07
Dentální vosk	84,92	65,46	0,36	13,52	33,34
Vzduch	125,67	63,54	0,49	14,93	77,55

3.4 Phase retrieval a tomografická rekonstrukce

Tato sekce pojednává o dalších krocích zobrazování ve fázovém kontrastu metodou volného šíření, a sice o aplikování algoritmu *phase retrieval* na naměřené projekce a následné rekonstrukci dat. Bude zde představena počítačová aplikace, jež byla vytvořena za účelem teoretického výpočtu koeficientů δ a β. V závěru sekce diskutuje vliv zvolení správného poměru koeficientů δ a β na vzorku dřevěného párátka.

3.4.1 Počítačová aplikace pro výpočet koeficientů δ a β

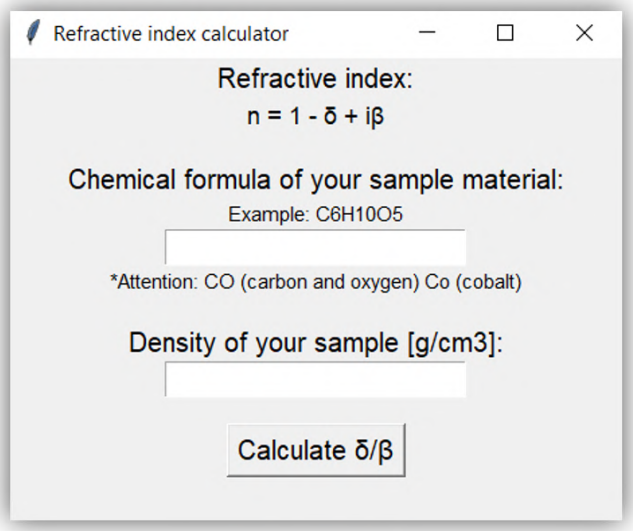
Abychom z naměřených projekčních dat získali informaci o fázových změnách, je nutné na data aplikovat algoritmus *phase retrieval*. V této diplomové práci byl využit algoritmus Davida Paganina [45], popsaný v sekci 2.2.4. Ze vztahu 2.19 vyplývá, že pro správné aplikování tohoto algoritmu na projekce, je nutná znalost poměru koeficientů δ a β, který slouží jako vstupní parametr.

Již v sekci 2.1.1, pojednávající o komplexním indexu lomu, byly uvedeny vztahy 2.6 a 2.7, pomocí nichž lze vypočítat hodnotu koeficientů δ a β. Ve vztazích vystupují atomové rozptylové koeficienty f_1 a f_2. Parametry δ a β vystupují, na základě těchto vztahů, jako násobky atomových rozptylových koeficientů, v závislosti na vlastnostech zkoumaného materiálu a energii použitého RTG záření.

Výpočet koeficientů δ a β je možné uskutečnit pomocí veřejně dostupných webových aplikací. Jednou z nich je kalkulačka vyvinutá centrem rentgenové optiky CXRO (z ang. „Center for Xray Optics“) [63]. Výstupem této webové aplikace je graf obou počítaných koeficientů, nebo textový soubor obsahující hodnoty obou parametrů. Rozsah energií RTG záření, pro který je možné parametry vypočítat, je 30 eV–30 keV [63]. Druhou možností je webová kalkulačka vytvořena Sergueiem Kuznetsovem [64]. V této webové aplikaci je výstupem textový soubor obsahující hodnoty počítaných parametrů pro zadaný rozsah enegií 0,01 – 100 keV. V obou případech je vstupním parametrem chemický prvek, nebo chemický vzorec zkoumaného materiálu. Dalšími vstupními parametry jsou hustota zkoumaného vzorku a rozsah energií RTG záření, pro něž chceme parametry δ a β určit.

Tyto webové aplikace jsou spolehlivým způsobem, jak koeficienty δ a β vypočítat. Uživatel však musí požadovaný poměr těchto koeficientů dopočítat sám. Takový způsob je tedy časově náročný a z uživatelského hlediska neefektivní. Celá tato práce zabývá optimalizací metody volného šíření. V rámci této práce tedy byla v programovacím jazyce Python vytvořena aplikace pro výpočet tohoto poměru. K aplikaci bylo naprogramováno i jednoduché uživatelské prostředí (GUI). Vstupními parametry této aplikace jsou pouze chemický prvek, případně chemický vzorec měřeného vzorku. Náhled na GUI této aplikace je znázorněn na obrázku 3.26. Pro vytvoření

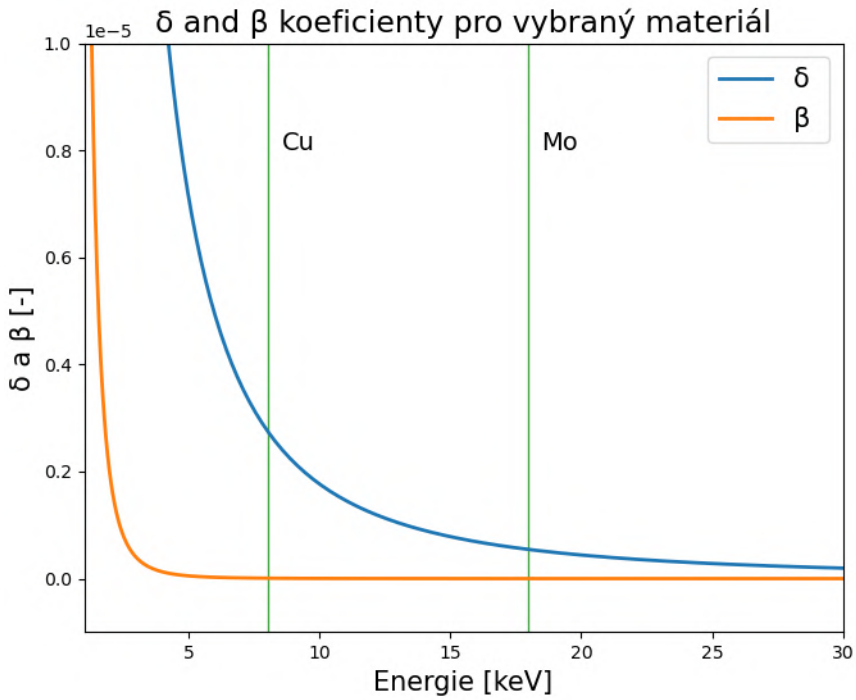
aplikace bylo využito tabelovaných hodnot atomových rozptylových koeficientů f_1 a f_2 dostupných z [26] a [63]. Tyto tabulky obsahují databázi atomových rozptylových koeficientů pro prvních 92 elementů z periodické soustavy prvků, kde byly nejprve experimentálně určeny hodnoty koeficientu f_2 a následně byl, pomocí Kramersových-Kronigových relací, dopočítán koeficient f_1 [23].



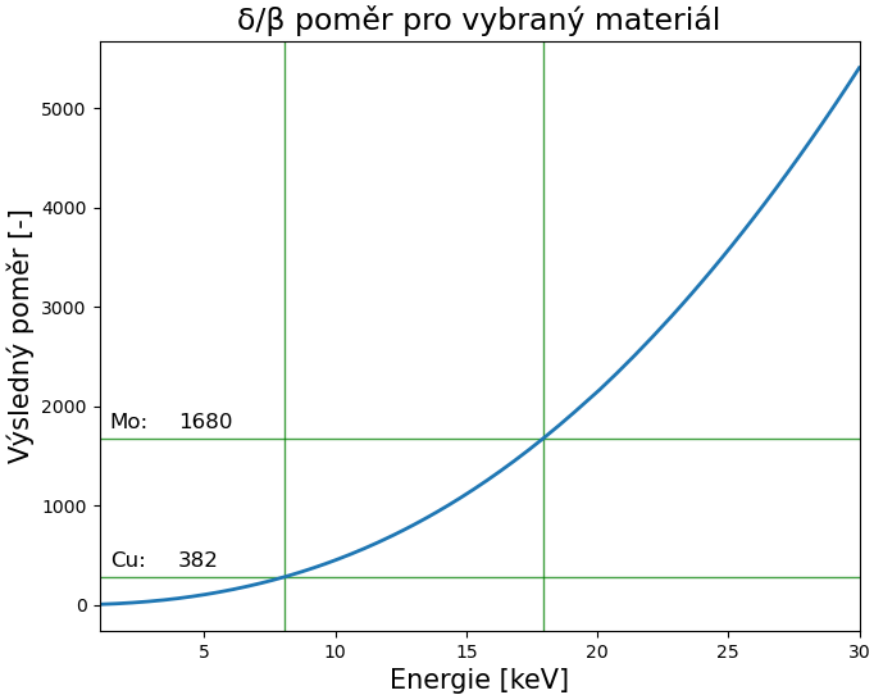
Obr. 3.26: Náhled na grafické uživatelské prostředí aplikace vytvořené pro výpočet poměru koeficientů δ a β.

Poté, co uživatel zadá chemický vzorec, proběhne výpočet molární hmotnosti dané sloučeniny. K tomuto kroku je v aplikaci využito knihovny Molmass, vytvořenou Christophem Gohlkem [65]. Následuje automatická separace jednotlivých chemických prvků obsažených v zadané chemické sloučenině a import databází atomových rozptylových koeficientů jednotlivých prvků. Aplikace byla v této fázi vyvinuta pro využití v kombinaci s přístrojem Rigaku Nano3DX, proto obsahuje dvě definovaná spektra rentgenového záření (Cu a Mo spektrum). V případě měděné anody je majoritní část využívaného spektra tvořena charakteristickým zářením K_α, jehož energie je 8,1 keV. Pro molybdenovou anodu byla stejným způsobem definována energie 17,4 keV [66]. Z těchto hodnot je v aplikaci vypočítána vlnová délka. Poté jsou pomocí vztahů 2.6 a 2.7 dopočítány a vykresleny do grafu koeficienty δ a β, stejně tak i jejich poměr.

Ukázka výstupů je zobrazena na snímcích 3.27 a 3.28. Tyto hodnoty byly vypočteny pro dřevěné párátko o hustotě 0,8 g/cm^3. Chemický vzorec dřeva byl zvolen $C_6H_{10}O_5$, jakožto chemický vzorec celulózy, která tvoří jeho největší část [67].



Obr. 3.27: Graf závislosti hodnoty koeficientů δ a β na energii záření. V grafu jsou vyznačena K_α záření ve spektru měděné a molybdenové anody.



Obr. 3.28: Graf vypočteného poměru koeficientů δ a β. V grafu jsou vyznačena K_α záření ve spektru měděné a molybdenové anody.

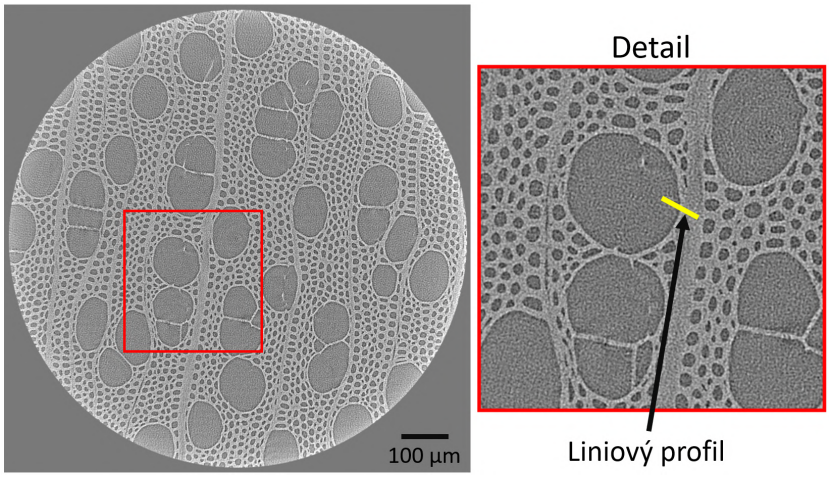
3.4.2 Ověření teoretického výpočtu koeficientů δ a β

Předchozí část této sekce popisovala aplikaci sloužící k výpočtu poměru mezi koeficienty δ a β. V této části se práce věnuje popisu a znázornění vlivu algoritmu *phase retrieval* na výsledné tomografické řezy. Na základě teorie tohoto algoritmu, jež byla uvedena v sekci 2.2.4, by v důsledku jeho aplikace na naměřené projekce mělo dojít k odstranění vzniklého hranového efektu a výraznému zvýšení kontrastu mezi materiálem měřeného vzorku a pozadím vzorku.

Tab. 3.3: Parametry nastavení tomografického měření dřevěného párátka.

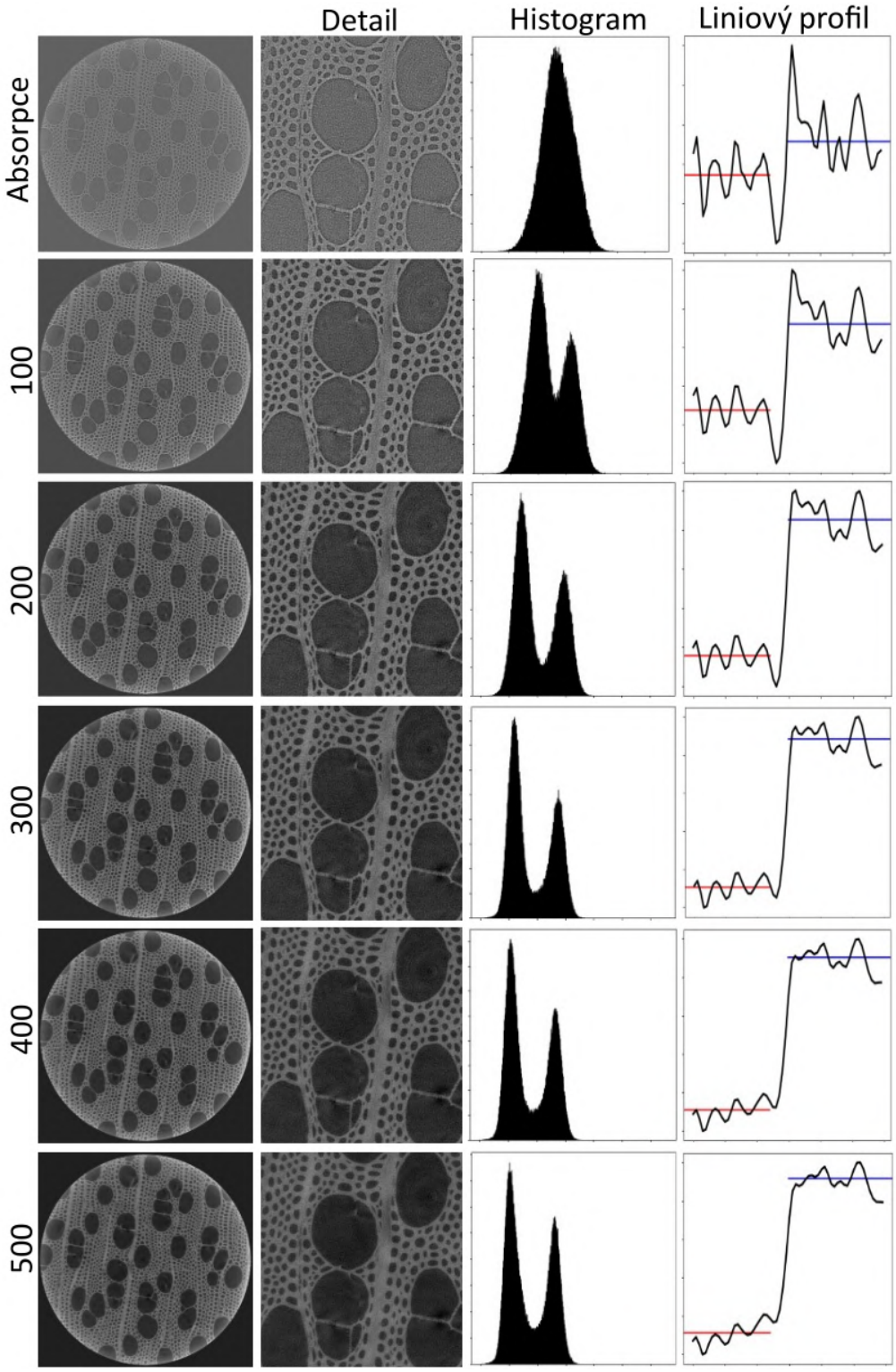
	Dřevěné párátko
Napětí [kV]	40
Proud [mA]	30
Materiál anody	Cu
Optika	L0270
Binning	2
Expozice [s]	23
Počet projekcí	800
Vzdálenost R_2 [mm]	1

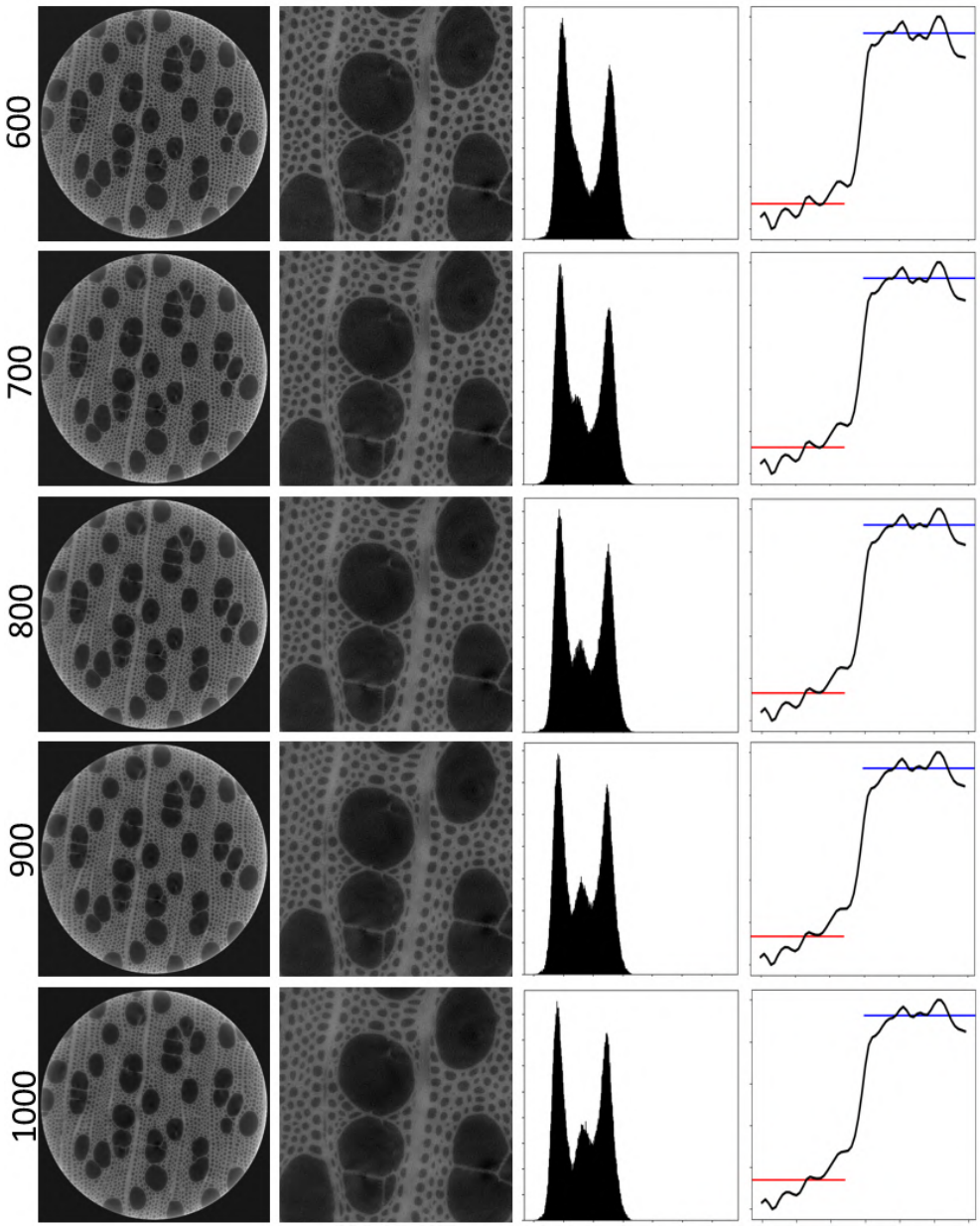
Pro testování těchto teoretických předpokladů byl zvolen vzorek dřevěného párátka. Naměřená projekční data jsou dostupná na webových stránkách Narodního repozitáře [68]. Shrnutí parametrů použitých pro tomografické měření je uvedeno v tabulce 3.3. Na obrázku 3.29 je znázorněn řez párátkem (absorpční kontrast) s vyznačenými oblastmi, na nichž byla provedena následná analýza.



Obr. 3.29: Tomografický řez dřevěným párátkem, včetně vyznačené detailní oblasti a oblasti liniového profilu, jehož analýza je zobrazena na obrázku 3.30.

Na naměřená projekční data vzorku byl postupně aplikován algoritmus s deseti poměry δ a β v rozmezí 100–1000. Ideálním poměrem, vypočítaným vytvořenou aplikací je poměr 382 (viz 3.28). Výsledky tohoto experimentu jsou znázorněny obrázkem 3.30.





Obr. 3.30: Efekt správného vstupního parametru do algoritmu *phase retrieval*. Hodnoty vlevo označují aplikovanou hodnotu poměru parametrů δ a β. Modrá a červená vertikální linka označují průměrné hodnoty intenzity vzorku a pozadí.

Na tomto obrázku jsou znázorněny všechny důležité projevy aplikace algoritmu *phase retrieval*. Již při pohledu na snímky detailu dřevěného párátka, dochází k výraznému navýšení kontrastu mezi pozadím a měřeným dřevem. Tento projev je dokázán i na histogramu jednotlivých snímků. Vidíme, že dochází k rozdělení histogramu na více peaků, což umožňuje výrazně jednodušší separaci vzorku od pozadí při následné analýze. Liniový profil jednotlivých snímků poté ukazuje, že opravdu dochází k potlačení hranového efektu. Pro poměr $\delta/\beta = 400$ je hranový efekt již

zcela potlačen. Všimněme si, že efektem tohoto algoritmu je zároveň výrazné potlačení šumu v porovnání s absorpčními daty. Algoritmus totiž zároveň funguje jako filtr typu dolní propust (odstranění vysokých frekvencí). Pro vyšší hodnoty tohoto poměru poté dochází k rozmazávání jednotlivých hran. V histogramu se postupně objevuje i třetí peak, který je tvořen rozmazanými vnitřními strukturami. Teoreticky vypočítaná hodnota tak v tomto případě perfektně koreluje s tímto experimentem.

Díky aplikaci, počítající poměr koeficientů δ a β, je tedy vytvořena cesta k optimálnímu nastavení algoritmu *phase retrieval*. Uživatel tak ještě před aplikováním tohoto algoritmu zjistí, pro jaké nastavení by měl být výsledek tomografické rekonstrukce nejlepší. V reálných případech ovšem může nastat situace, ve které bude měřený vzorek nečekaně obsahovat i jinou chemickou sloučeninu. Proto je v praxi lepší prověřit správnost výpočtu i na intervalu blízkém teoretické hodnotě (viz 3.30).

3.5 Aplikace vytvořené metodiky

Tato sekce využívá vytvořené metodiky pro uskutečnění dvou aplikačních měření s optikou L270. Pro tato měření byly vybrány dva vzorky s nízkou hustotou, jejichž zobrazení je absorpčním způsobem problematické. Pro měření s využitím měděné anody byl zvolen vzorek papíru. Molybdenová anoda byla poté využita pro měření glukosaminové tabletky.

3.5.1 Vzorek papíru

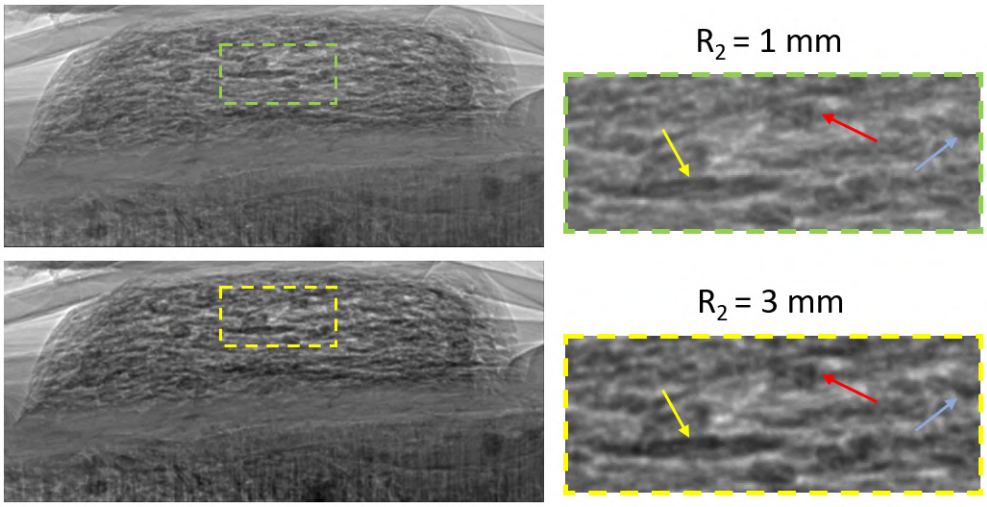
Vytvořená metodika byla aplikovaná na vzorek papíru od společnosti Zing [69]. Pro měření byl konkrétně využit dřevnatý model papíru Biotop 3, s hustotou 0,77 g/cm^3, který neobsahuje optické rozjasňovače [69]. Vzorek byl, na základě tabulky 3.2, připraven pomocí parafilmové fólie. Přínosem zobrazení tohoto vzorku ve fázovém kontrastu by mohla být jednodušší a přesnější analýza jeho vnitřní struktury. Metoda by tak mohla sloužit pro spolehlivější kontrolu kvality vyrobeného papíru.

Tab. 3.4: Parametry nastavení tomografického měření vzorku papíru.

	1. Měření – papír	**2. Měření – papír**
Napětí [kV]	40	40
Proud [mA]	30	30
Binning	2	2
Expozice [s]	12	11
Počet projekcí	800	800
Vzdálenost R_2 [mm]	3	1

Po umístění vzorku do přístroje byly naměřeny projekce ve vzdálenostech $R_2 = 1 - 15\,\text{mm}$ od detektoru. Následně byly vyhodnoceny a normalizovány všechny parametry popsané v sekci 3.2. Z těchto parametrů a parametru prostorového rozlišení bylo vypočteno celkové skóre (viz obrázek 3.31). Z obrázku vyplývá, že nejlepší vzdálenost pro měření tohoto vzorku je ve vzdálenosti $R_2 = 3\,\text{mm}$.

Obr. 3.31: Výsledné skóre pro nalezení optimální pozice pro vzorek papíru.

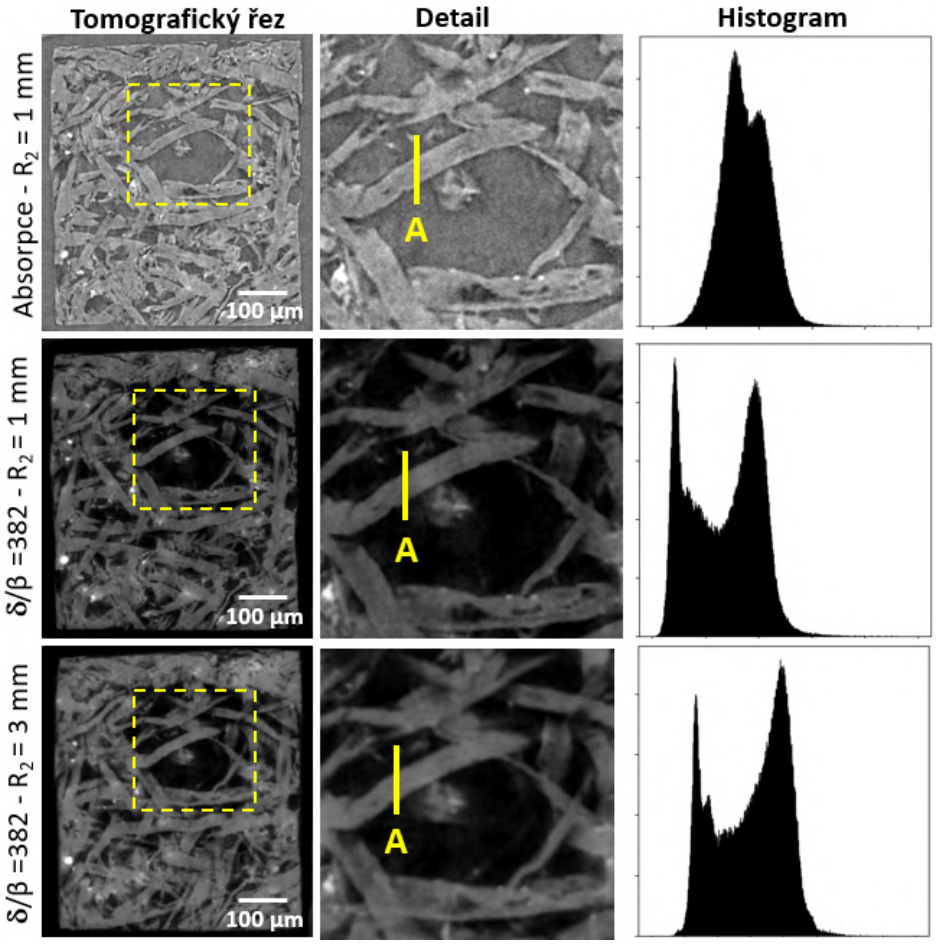


Obr. 3.32: Srovnání RTG projekcí ze vzdálenosti 1 a 3 mm od detektoru.

Celkem byla provedena dvě tomografická měření (viz tabulka 3.4). Cílem bylo ukázat přínos vytvořené metodiky. První měření proběhlo v optimální pozici. Pro

druhé byl vzorek umístěn co nejblíže k detektoru, aby byl ukázán výsledek dosažený absorpční metodou. Kvůli rozměrům vzorku byla tato vzdálenost $R_2 = 1\,\text{mm}$.

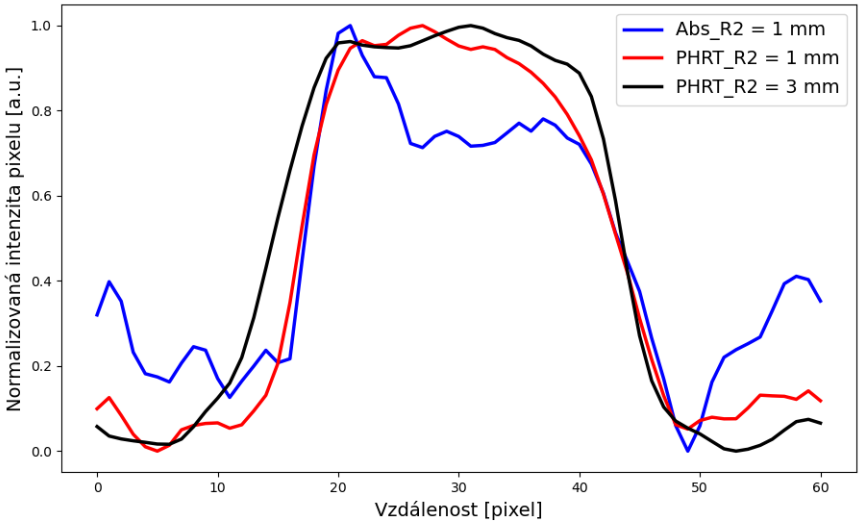
Na obrázku 3.32 jsou znázorněny RTG projekce papíru. Vidíme, že v porovnání s absorpčním režimem došlo k navýšení kontrastu okolo vnitřních struktur. Místa, kde je tento efekt pozorovatelný, jsou vyznačena pomocí šipek. Po dokončení akvizice rentgenových projekcí následoval výpočet poměru koeficientů δ a β. Jelikož se jedná o dřevnatý typ papíru, stanovená hodnota poměru byla stejná, jako v případě párátka, a sice 382. Výsledky tomografické rekonstrukce jsou znázorněny na obrázku 3.33.



Obr. 3.33: Znázornění tomografických řezů vzorku papíru z obou měření. V obrázku je nejprve rekonstrukce absorpčních dat a následně i dat po algoritmu *phase retrieval*. Úsečka A označuje oblast liniového profilu znazorněného na obrázku 3.34.

Z tohoto obrázku je patrné, že v porovnání s absorpčními daty došlo k výrazné změně v histogramu. Díky zobrazení ve fázovém kontrastu jsme od sebe mnohem lépe rozlišit pozadí vzorku a papírová vlákna. Při porovnání fázových tomografických řezů ze vzdáleností 1 a 3 mm vidíme, že jejich histogramy jsou velmi podobné. Nicméně při bližším pohledu na detail řezu je možné si všimnout, že jednotlivá vlákna papíru

mají v případě měření v optimální vzdálenosti jednolitější barvu po celém povrchu. Pro znázornění tohoto jevu byl přes oblast výrazného papírového vlákna vykreslen liniový profil. Ten si můžeme prohlédnout níže na obrázku 3.34. Vidíme, že v případě měření v optimální vzdálenosti je průběh křivky v oblasti papírového vlákna téměř konstantní. To je způsobeno tím, že v projekčních datech bylo dosaženo většího zvýraznění okolo všech hran.

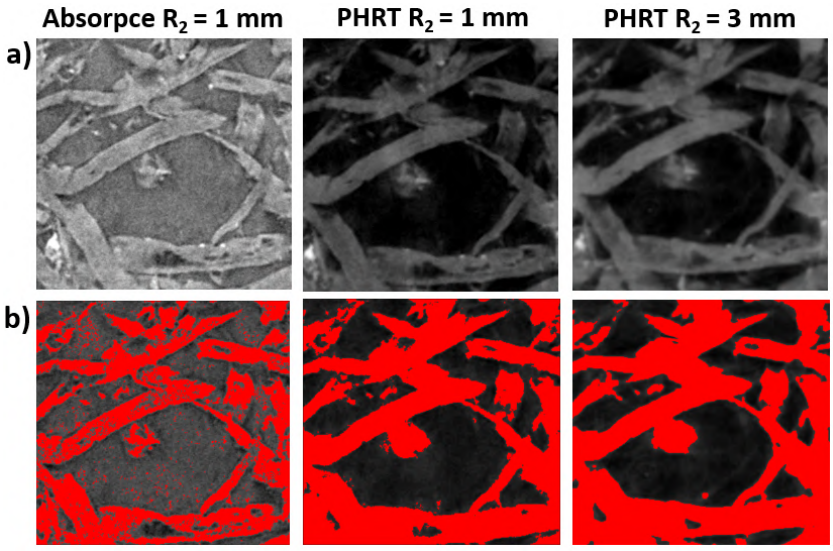


Obr. 3.34: Liniový profil přes vlákno papíru. Zkratka Abs značí zrekonstruovaná absorpční data, PHRT označuje řezy po aplikaci algoritmu *phase retrieval*.

Tab. 3.5: Parametry kvality obrazu vyhodnocené na tomografických řezech vzorku papíru.

	SNR	**C [%]**	**BRIRSQUE**	**Ostrost**
Absorpce $R_2 = 1$ mm	12,53	13,75	31,51	0,98
PHRT $R_2 = 1$ mm	80,32	53,05	38,81	0,87
PHRT $R_2 = 3$ mm	89,74	53,39	38,92	0,86

Na tomografických řezech ukázaných na obrázku 3.33 byly v rámci kvantitativní analýzy vyhodnoceny parametry kvality obrazu. V tabulce 3.5 jsou všechny vypočtené parametry zapsány. Z důvodu potlačení šumu algoritmem *phase retrieval*, došlo k výraznému zvýšení parametru SNR. Díky tomu, že algoritmus zároveň využil haló efektu, vzniklého okolo všech hran, byla velmi navýšena i hodnota kontrastu. Došlo pak k mírnému zhoršení parametrů BRISQUE a ostrosti. V případě PHRT řezu ve vzdálenosti $R_2 = 1$ mm je toto zhoršení způsobené pouze algoritmem *phase retrieval*. V případě měření v optimální vzdálenosti byly tyto hodnoty ovlivněny i zhoršujícím se prostorovým rozlišením.



Obr. 3.35: Ukázka automatické Otsu segmentace jednotlivých papírových vláken.

Benefitem, který jednolitost vláken stejného materiálu přináší, je jednodušší a přesnější segmentace materiálu a jeho případná analýza. Na obrázku 3.35 je ukázka segmentace papírových vláken. Pro všechny tři znázorněné segmentace byla využita automatická prahovací metoda Otsu, která je založena na hledání hodnoty optimálního prahu na základě analýzy histogramu intenzit [70]. Vidíme, že v případě segmentace řezu vytvořeného z dat ze vzdálenosti $R_2 = 3\,\mathrm{mm}$ je výsledek plynulejší na všech hranách. Na rozdíl od segmetací provedených na datech pořízených ve vzdálenosti $R_2 = 1\,\mathrm{mm}$ došlo k přesnému oddělení vláken od pozadí vzorku.

3.5.2 Vzorek glukosaminové tablety

Oblastí, ve které zobrazování ve fázovém kontrastu přináší mnohé výhody, je rovněž farmaceutický průmysl. Nedestruktivní 3D zobrazení farmaceutických produktů poskytuje jejich výrobcům možnost kontroly výrobního procesu. V případě, že se tyto produkty skládají z více látek, uspořádaných ve vrstvách, může výpočetní tomografie podat přesné informace např. o jejich tloušťce, nebo vzájemném propojení. Látky, z nichž se tyto produkty skládají, ovšem často vykazují velmi podobný útlum RTG. Z tohoto důvodu je při jejich zobrazování klasickou absorpční výpočetní tomografií relativně obtížné dosáhnout dostatečného kontrastu mezi jednotlivými látkami.

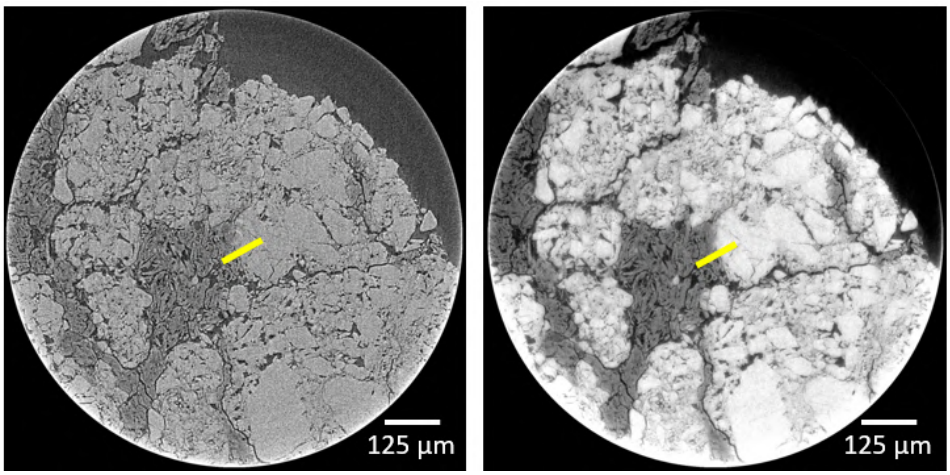
Vytvořená metodika byla tedy aplikována i na vzorek glukosaminové tablety. Měření probíhalo stejně jako v předchozím případě s využitím optiky L270. Kvůli velikosti zorného pole byl z původního tvaru vybroušen válec o průměru 1 mm. Pro měření tohoto vzorku byla zvolena molybdenová anoda v kombinaci s hliníkovým filtrem (0,1 mm).

Tab. 3.6: Parametry nastavení tomografického měření glukosaminové tablety.

	Glukosaminová tableta
Napětí [kV]	50
Proud [mA]	24
Binning	2
Expozice [s]	13
Počet projekcí	800
Vzdálenost R_2 [mm]	2

Z projekcí tohoto vzorku ze vzdáleností R_2 =1–15 mm bylo vyhodnoceno skóre, podle kterého byla optimální vzdálenost $R_2 = 2$ mm. Parametry, jež byly pro měření použity, jsou uvedeny v tabulce 3.6.

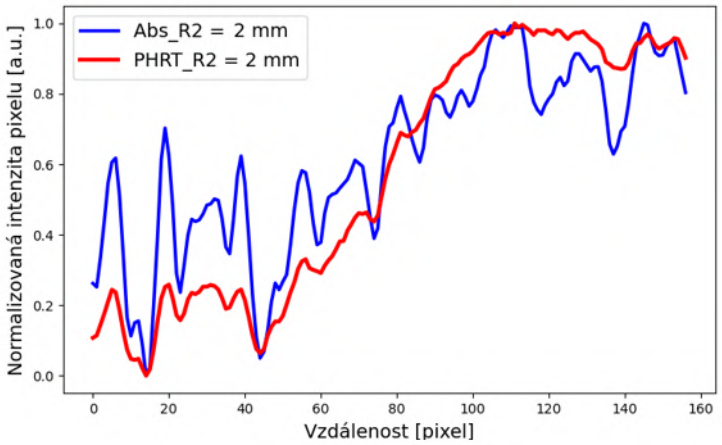
Před aplikací algoritmu *phase retrieval* na získaná projekční data byl vypočítán poměr koeficientů δ a β. Chemický vzorec měřeného vzorku, tedy glukosaminu, je $C_6H_{13}NO_5$ [71]. Pro energii charakteristických peaků ve spektru generovaném molybdenovou anodou je vypočítaný poměr $\delta/\beta = 1650$. Ukázky řezu glukosaminem jsou zobrazeny na obrázku 3.36.



Obr. 3.36: Řezy glukosaminového vzorku vytvořené tomografickou rekonstrukcí. Vlevo je znázorněn řez absorpčního kontrastu, vpravo je řez vytvořený z dat modifikovaných algoritmem *phase retrieval*.

Na obrázku 3.36 vidíme, že v případě absorpčního kontrastu jsme vizuálně schopni detekovat dva materiály. Kontrast mezi těmito dvěma materiály je ovšem velmi nízký, tudíž by separace pouze jednoho z nich byla velmi obtížná. V případě dat po aplikaci algoritmu *phase retrieval* je patrné, že kontrast mezi těmito dvěma látkami je mnohem vyšší. To je rovněž znázorněno na obrázku 3.37, na kterém vidíme li-

niový profil vykreslený z oblasti žluté úsečky z obrázku 3.36. Z liniového profilu je zřejmé, že došlo k výraznému potlačení šumu a zároveň k jednoznačnému rozdílu mezi normalizovanou intenzitou pixelů obou materiálů vyskytujících se ve vzorku.



Obr. 3.37: Graf liniového profilu vzorku glukosaminu. Oblast, ze které je tento profil vykreslen, je znázorněna na obrázku 3.36 žlutou úsečkou.

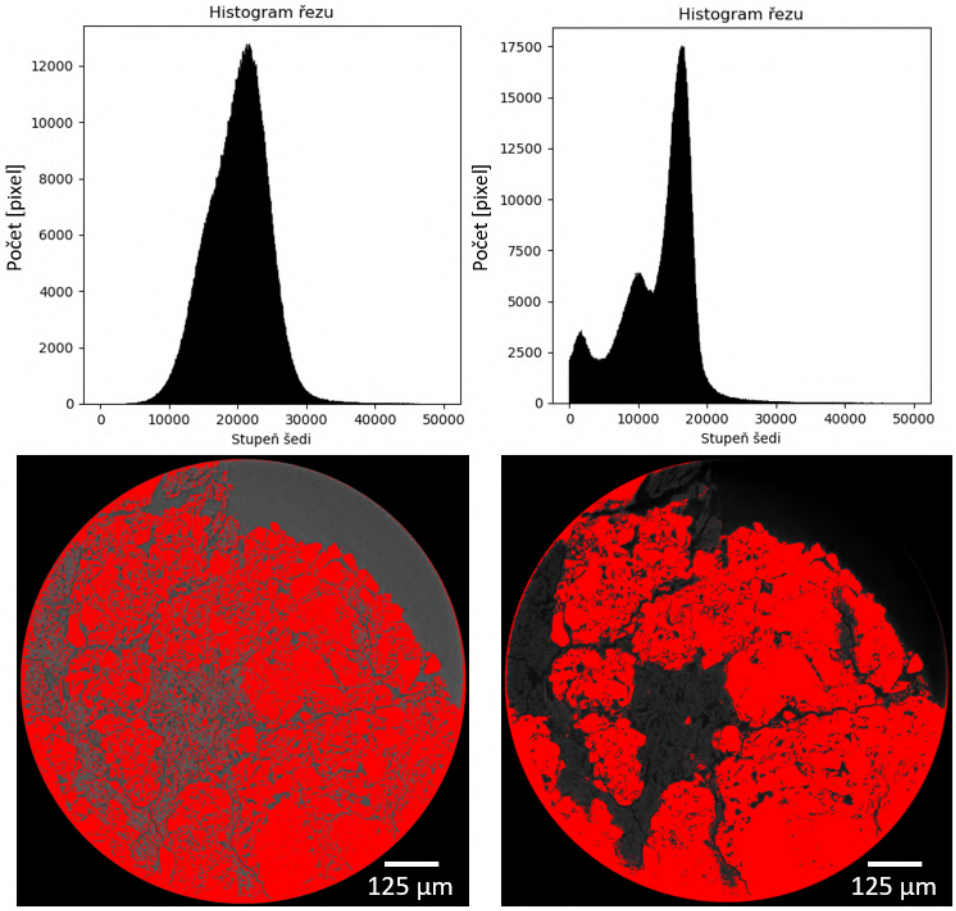
Byla opět provedena kvantitativní analýza tomografických řezů znázorněných na obrázku 3.36. V tabulce 3.7 jsou zaznamenány vypočtené hodnoty parametrů kvality obrazu. Vidíme, došlo opět k výraznému zlepšení parametrů SNR a kontrastu. Na rozdíl od měření vzorku papíru se zlepšila i hodnota parametru BRISQUE, což je pravděpodobně způsobeno více než pětinásobným navýšením kontrastu ve výsledných řezech. Hodnota parametru ostrosti se pak, z důvodu aplikace algoritmu *phase retrieval*, velmi mírně zhoršila.

Tab. 3.7: Parametry kvality obrazu vyhodnocené na tomografických řezech vzorku glukosaminu.

	SNR	**C [%]**	**BRIRSQUE**	**Ostrost**
Absorpce $R_2 = 2$ mm	9,65	17,40	42,24	1,07
PHRT $R_2 = 2$ mm	20,50	89,13	32,69	0,98

V rámci analýzy uskutečněného měření byla provedena automatická segmentace měřeného materiálu metodou Otsu [70]. Cílem byla segmentace pouze jednoho ze dvou pozorovaných materiálů. Výsledek Otsu metody je znázorněn na obrázku 3.38. V horní části jsou rovněž vykresleny histogramy obou těchto řezů. Vidíme, že díky změně v distribuci stupňů šedi jsou od sebe jednoznačně rozlišitelné tři peaky (pozadí, materiál 1 a materiál 2). Optimalizovaná metoda zobrazení ve fázovém kontrastu umožnila velmi precizní separaci jednoho z materiálů. Je tedy možné vytvořit

například přesnou analýzu procentuálního zastoupení jedné látky vůči druhé, nebo vizualizovat způsob jejich vzájemného propojení.



Obr. 3.38: Ukázka automatické Otsu segmentace jednoho z materiálů ve vzorku glukosaminové tablety. Vlevo je řez zrekonstruovaný z absorpčních dat, vpravo je řez vytvořený z dat po aplikaci algoritmu *phase retrieval*. V horní části obrázku jsou znázorněny histogramy obou řezů.

Závěr

Tato diplomová práce se zaměřuje na optimalizaci rentgenové počítačové tomografie pro zobrazování vzorků s nízkou hustotou. Hlavním cílem práce bylo vyvinout metodiku pro měření tohoto typu vzorků. Experimenty byly prováděny v laboratoři rentgenové mikro a nano výpočetní tomografie CEITEC VUT, konkrétně na přístroji Rigaku Nano3DX.

V teoretické části práce byla provedena důkladná rešerše obecných principů počítačové tomografie, zejména z hlediska jejich fyzikální podstaty. Práce se tak zabývá vznikem rentgenového záření, jeho interakcí s měřeným objektem a následnou detekcí. Dále byl popsán matematický aparát pro rekonstrukci tomografických dat. V druhé části teorie se práce zaměřuje na metody zobrazování ve fázovém kontrastu, s důrazem na metodu volného šíření záření.

Experimentální část práce se již věnuje samotné optimalizaci metody volného šíření, která umožňuje překonání limitů konvenční počítačové tomografie při zobrazování vzorků s nízkou hustotou. Tato optimalizace zahrnuje nalezení správných parametrů pro akvizici tomografických dat a jejich následnou rekonstrukci.

Optimální výsledek akvizice tomografických dat pomocí metody volného šíření je úzce spojen s nalezením vhodné vzdálenosti mezi vzorkem a detektorem. Na syntetických vláknech byl nejprve zkoumán vývoj kontrastu na hranách vzorku, v závislosti na jejich průměru a vzdálenosti od detektoru. Bylo tak zjištěno, že s rostoucí vzdáleností od detektoru se kontrast zvyšuje, dosahuje maximální hodnoty, ale poté začne klesat. Experimentálně bylo zjištěno, že vzdálenost pro dosažení maximálního kontrastu je specifická pro daný materiál vzorku. V rámci metodiky bylo k nalezení optimální vzdálenosti pro měření vzorku přistoupeno výpočtem skóre. Skóre bylo získáno na základě hodnocení celkem pěti nezávislých normalizovaných parametrů, které byly vyhodnocovány z pořízených projekčních dat. Pomocí těchto parametrů byl nalezen ideální poměr mezi zlepšujícím se kontrastem na strukturách vzorku a postupně se zhoršujícím prostorovým rozlišením. Na projekcích jednotlivých vzorků byl následně ukázán přínos měření v optimální pozici.

Následné rekonstrukci projekčních dat, získaných metodou volného šíření, předchází aplikace algoritmu *phase retrieval*, který jako vstup vyžaduje vhodný poměr parametrů δ a β, vyjadřujících změnu fáze záření vůči jeho útlumu. Na základě rešerše byla v rámci této práce, v prostředí programovacího jazyka Python, vytvořena aplikace sloužící k teoretickému výpočtu poměru těchto dvou koeficientů. Předpokladem pro správný výpočet je znalost chemického složení a hustoty měřeného materiálu. Na řezech dřevěného párátka byl názorně ukázán efekt volby správného poměru těchto dvou koeficientů.

Vyvinutá metodika zahrnuje způsob nalezení vhodné vzdálenosti vzorku od detektoru pro akvizici dat a zároveň výpočet poměru koeficientů δ a β pro jejich zpracování. V rámci této práce byla metodika rovněž prakticky otestována. Testování proběhlo na vzorku papíru a glukosaminové tablety. Kvalitativně i kvantitativně byl na projekcích a tomografických řezech těchto vzorků popsán efekt aplikace optimalizované metody volného šíření.

Díky metodě volného šíření a její optimalizaci byly překonány limity absorpční počítačové tomografie při zobrazování vzorků s nízkou hustotou. Vyvinutá metodika umožňuje přesnou segmentaci a analýzu vzorků, které jsou obtížně zobrazitelné pomocí konvenčních metod. Praktické využití této metodiky může přispět k přesnější kontrole kvality farmaceutických produktů, syntetických materiálů či výzkumu biologických tkání.

Literatura

[1] HSIEH, J. Computed Tomography: Principles, Design, Artifacts, and Recent Advances [online]. SPIE Press, 2003. SPIE Press monograph. ISBN 978081944425

[2] BUSHBERG, Jerrold T., J. Anthony SEIBERT, Edwin M. LEIDHOLDT JR. a John M. BOONE, , Charles W. Mitchell, ed. The Essential Physics Of Medical Imaging. 3rd ed. Philadelphia, United States: Lippincott Williams and Wilkins, 2011, 1048 s. ISBN 978-0-7817-8057-5.

[3] VAN DER PLAATS, Gerardus Jacobus, 1980. Medical X-Ray Techniques in Diagnostic Radiology: A textbook for radiographers and Radiological Technicians. 4th edition. London, United Kingdom: The Maxmillan Press. ISBN 978-1-349-04630-0.

[4] JOSHI, A., Kumar, Alok. (2003). What can we learn from the electromagnetic spectrum?. Resonance. 8. 8-25. 10.1007/BF02835801.

[5] CARMIGNATO, Simone, Wim DEWULF a Richard LEACH, ed., 2018. Industrial X-Ray Computed Tomography. Cham, Switzerland: Springer International Publishing. ISBN 978-3-319-59573

[6] MUSIL, Tomáš, 2015. Elektronový sluchátkový zesilovač. Brno. Bakalářská práce. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií. Vedoucí práce Doc. Ing. Jiří Háze, Ph.D.

[7] MALEČEK, L.Konstrukce motorizovaného výměníku filtrů pro tomografický systém Rigaku Nano3DX. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2021. 57 s. Vedoucí Ing. Tomáš Zikmund, Ph.D.

[8] HUDA, Walter, BROWN, Brian a Ryan SHAW, ed., 2010. Review of Radiologic Physics. 3rd. ed. Philadelphia: LippincottWilliams and Wilkins. ISBN 978-0-7817-8569-3.

[9] MARTZ JR., Harry E., Clint M. LOGAN, Daniel J. SCHNEBERK and Peter J. SHULL. X-ray imaging: fundamentals, industrial techniques, and applications. Boca Raton: Taylor and Francis, CRC Press, 2017. ISBN 978-0-8493-9772-1.

[10] X-Ray Data Booklet. In: X-Ray Data Booklet [online]. [cit. 2021-5-7]. Dostupné z: https://xdb.lbl.gov/Section1/Table1-2.pdf

[11] LENGELER, Bruno, 2001. Coherence in X-ray physics. Naturwissenschaften. Aachen, Germany: Springer, 2001(88), 249-260. Dostupné z: doi:DOI 10.1007/s001140100221

[12] NJOKU, Eni G., ABRAMS, Michael J., Ghassem R. ASRAR, Frank S. MARZANO, Peter J. MINNETT, F. Joseph TURK, Vernon H. SINGHROY a Vincent V. SALOMONSON, ed., 2014. Encyclopedia of Earth Sciences Series: Encyclopedia of Remote Sensing. Pasadena, California, USA: Springer Science+Business Media. ISBN 978-0-387-36698-2.

[13] SALEH, Bahaa E. A. a Malvin Carl TEICH. Základy fotoniky. Praha: Matfyzpress, 1994. ISBN 978-80-85863-12-3.

[14] KALASOVÁ, Dominika. Využití fázového kontrastu v rentgenové počítačové tomografii. Brno, 2016. 56 s. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství. Vedoucí práce Tomáš ZIKMUND.

[15] ALS-NIELSEN, Jens a Des MCMORROW, 18 March 2011n. l. Elements of Modern X-ray Physics. 2nd. Sussex, United Kingdom: John Wiley, 421 s. ISBN 978-1-119-99731-3. Dostupné z: doi:10.1002/9781119998365

[16] BORN, Max a Emil WOLF, 1999. Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light. 7th expanded ed. Cambridge:Cambridge Univ. Press. ISBN 05-216-4222-1. Dostupné z: doi:10.1017/CBO9781139644181

[17] KAK, Avinash C. and Malcolm SLANEY. Principles of computerized tomographic imaging. New York: IEEE Press, 1999. ISBN 08-794-2198-3

[18] MAIER, Andreas, Stefan STEIDL, Vincent CHRISTLEIN a Joachim HORNEGGER, ed., 2018. Medical Imaging Systems: An Introductory Guide. Erlangen, Germany: Springer Cham, 259 s. ISBN 978-3-319-96520-8. Dostupné z: doi:https://doi.org/10.1007/978-3-319-96520-8

[19] GREENBERGER, Daniel, Klaus HENTSCHEL a Friedel WEINERT, ed., 25 July 2009n. l. Compendium of Quantum Physics: Concepts, Experiments, History and Philosophy. Heidelberg: Springer Berlin, 901 s. ISBN 978-3-540-70622-9. Dostupné z: doi:10.1007/978-3-540-70626-7

[20] HALLIDAY, David, Robert RESNICK a Jearl WALKER, 2000. Fyzika: vysokoškolská učebnice obecné fyziky. Brno: VUTIUM. Překlady vysokoškolských učebnic. ISBN 80-214-1869-9.

[21] ZEMEK, Marek. Method for Extending the Field of View for X-ray Computed Tomography with Submicron Resolution. Brno, Rok, 89 p. Master's Thesis. Brno University of Technology, Faculty of Electrical Engineering and Communication, Department of Biomedical Engineering. Advised by Ing. Martin Mézl, Ph.D.

[22] Rychlost světla, 2001-. In: Wikipedia: the free encyclopedia [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 28. 04. 2023, 2020-03-08 [cit. 2023-04-28]. Dostupné z: https://cs.wikipedia.org/w/index.php?title=Rychlostsv

[23] ATTWOOD, David, 1999. Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications. Cambridge: Cambridge University Press. ISBN 978-0-521-65214-8.

[24] IDA, Nathan a Norbert MEYENDORF, ed., 29 July 2019n. l. Handbook of Advanced Nondestructive Evaluation. Cham, Switzerland: Springer Cham, 1626 s. ISBN 978-3-319-26552-0. Dostupné z: doi: https://doi.org/10.1007/978-3-319-26553-7

[25] BARUCHEL, José. X-ray tomography in material science. Paris: Hermes Science,2000. 204 s. ISBN 978-2-7462-0115-6.

[26] HENKE, B., E. GULLIKSON and J. DAVIS. X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at E = 50-30,000 eV, Z = 1-92. Atomic Data and Nuclear Data Tables [online]. 1993, vol. 54, no. 2, pp. 181–342. ISSN 0092640X. Dostupné z: doi:10.1006/adnd.1993.1013

[27] VALDIVIA, Maria Pia, Dan STUTMAN, Christian STOECKL, Chad MILEHAM, Ildar A. BEGISHEV, Jake BROMAGE a Sean P. REGAN, 2018. Talbot–Lau x-ray deflectometry phase-retrieval methods for electron density diagnostics in high-energy density experiments. Applied Optics. 57(2), 1-8. ISSN 1559-128X. Dostupné z: doi:10.1364/AO.57.000138

[28] TAO, Siwei, Congxiao HE, Xiang HAO, Cuifang KUANG a Xu LIU, 2021. Principles of Different X-ray Phase-Contrast Imaging: A Review. Applied Sciences. 11(7), 1-22. ISSN 2076-3417. Dostupné z: doi:10.3390/app11072971

[29] BRAVIN, Alberto, Paola COAN a Pekka SUORTTI, 2013. X-ray phase-contrast imaging: from pre-clinical applications towards clinics. Physics in Medicine and Biology [online]. 58(1), R1-R35 [cit. 2023-04-26]. ISSN 0031-9155. Dostupné z: doi:10.1088/0031-9155/58/1/R1

[30] BONSE, U. a M. HART, 1965. An Xray Interferometer. Applied Physics Letters [Print]. 15 April 1965, 1965(6), 155–156 [cit. 2023-04-26]. ISSN 1077-3118. Dostupné z: doi:https://doi.org/10.1063/1.1754212

[31] TAKEDA, M., H. INA a S. KOBAYASHI, 1982. Fourier-transform method of fringe-pattern analysis for computer-based topography and interferometry. Journal of the Optical Society of America [online]. 1982, 1982(72), 156-160 [cit. 2023-04-26]. Dostupné z: doi:https://doi.org/10.1364/JOSA.72.000156

[32] MOMOSE, Atsushi. Phase-sensitive imaging and phase tomography using X-rayinterferometers. Optics Express. 2003, vol. 11, no. 19, s. 2303. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OE.11.002303.

[33] MOMOSE, A., 1995. Demonstration of phase-contrast X-ray computed tomography using an X-ray interferometer. Nuclear Instruments and Methods in Physics: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment [online]. Elsevier, 1. 1. 1995, 1995(352), 622-628 [cit. 2023-04-26]. ISSN 0168-9002. Dostupné z: doi:https://doi.org/10.1016/0168-9002(95)90017-9

[34] ENDRIZZI, Marco, 2018. X-ray phase-contrast imaging. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment [online]. 2017(vol. 878), 88-98 [cit. 2023-04-27]. ISSN 01689002. Dostupné z: doi:10.1016/j.nima.2017.07.036

[35] GOETZ, K, M P KALASHNIKOV, Yu A MIKHAĬLOV, G V SKLIZKOV, S I FEDOTOV, E FOERSTER a P ZAUMSEIL, 1979. Measurements of the parameters of shell targets for laser thermonuclear fusion using an x-ray schlieren method. Soviet Journal of Quantum Electronics. 1979(9), 607-610. ISSN 0049-1748. Dostupné z: doi:10.1070/QE1979v009n05ABEH009038

[36] SNIGIREV, A., I. SNIGIREVA, V. KOHN, S. KUZNETSOV a I. SCHELOKOV, 1995. On the possibilities of x-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiation. Review of Scientific Instruments. 1995(vol. 66), 5486-5492. ISSN 0034-6748. Dostupné z: doi:10.1063/1.1146073

[37] QUENOT, Laurene, Sylvain BOHIC a Emmanuel BRUN, 2022. X-ray Phase Contrast Imaging from Synchrotron to Conventional Sources: A Review of the Existing Techniques for Biological Applications. Applied Sciences. 2022(vol. 12), 1-17. ISSN 2076-3417. Dostupné z: doi:10.3390/app12199539

[38] WU, Xizeng a Hong LIU, 2007. Clarification of aspects in in-line phase-sensitive x-ray imaging. Medical Physics. 2007(vol. 34), 737-743. ISSN 00942405. Dostupné z: doi:10.1118/1.2431475.

[39] BURVALL, Anna, Ulf LUNDSTRÖM, Per A. C. TAKMAN, Daniel H. LARSSON a Hans M. HERTZ, 2011. Phase retrieval in X-ray phase-contrast imaging suitable for tomography. Optics Express. 2011(vol. 19), 10359-10376. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OE.19.01035

[40] WEITKAMP, T., D. HAAS, D. WEGRZYNEK a A. RACK, 2013. ANKAphase: software for single-distance phase retrieval from inline X-ray phase-contrast radiographs. Erratum. Journal of Synchrotron Radiation. 2013(vol. 20), 205-205. ISSN 0909-0495. Dostupné z: doi:10.1107/S0909049512044871

[41] HÄGGMARK, Ilian, William VÅGBERG, Hans M. HERTZ a Anna BURVALL, 2017. Comparison of quantitative multi-material phase-retrieval algorithms in propagation-based phase-contrast X-ray tomography. Optics Express. 2017,(vol. 25), 1-16. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OE.25.033543

[42] BRONNIKOV, Andrei V., 1999. Reconstruction formulas in phase-contrast tomography. Optics Communications. 1999(vol. 171), 239-244. ISSN 00304018. Dostupné z: doi:10.1016/S0030-4018(99)00575-1

[43] GROSO, A., R. ABELA a M. STAMPANONI, 2006. Implementation of a fast method for high resolution phase contrast tomography. Optics Express. 2006(vol. 14), 8103–8110. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OE.14.008103

[44] WU, Xizeng a Hong LIU, 2005. X-Ray cone-beam phase tomography formulas based on phase-attenuation duality. Optics Express. 2005(vol. 13), 6000-6014. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OPEX.13.006000

[45] PAGANIN, D., S. C. MAYO, T. E. GUREYEV, P. R. MILLER a S. W. WILKINS, 2002. Simultaneous phase and amplitude extraction from a single defocused image of a homogeneous object. Journal of Microscopy. 2002(vol. 206), 33-40. ISSN 0022-2720. Dostupné z: doi:10.1046/j.1365-2818.2002.01010.x

[46] BELTRAN, M.A., D.M. PAGANIN, K. UESUGI a M.J. KITCHEN, 2010. 2D and 3D X-ray phase retrieval of multi-material objects using a single defocus distance. Optics Express. 2010(vol. 18), 6423-6436. ISSN 1094-4087. Dostupné z: doi:10.1364/OE.18.006423

[47] GUREYEV, Timur E., Timothy J. DAVIS, Andrew POGANY, Sheridan C. MAYO a Stephen W. WILKINS, 2004. Optical phase retrieval by use of first Born- and Rytov-type approximations. Applied Optics. 2004(vol. 43), 2418-2430. ISSN 0003-6935. Dostupné z: doi:10.1364/AO.43.002418

[48] KALASOVÁ, Dominika. X-ray nano computed tomography of structured polymeric biomaterials. Brno, 2019. 84 pp. Doctoral thesis. Brno University of Technology. Central European Institute of Technology. Supervisor Jozef KAISER.

[49] CTLAB X-ray computed tomography: Vybavení [online], 2023. CEITEC - Central European Institute of Technology [cit. 2023-05-03]. Dostupné z: https://ctlab.ceitec.cz/

[50] Rigaku Global Website: PRODUCTS: nano3DX [online], 2021. [cit. 2023-05-01]. Dostupné z: https://imaging.rigaku.com/

[51] JIMA-C006-R:2006, 2006. Japan Inspection Instruments Manufactures Association: Micro Resolution Chart for X-Ray. Tokyo: JIMA.

[52] Cactux: Phantoms: Spirit series [online], 2021. Brno: CactuX [cit. 2023-05-11]. Dostupné z: https://cactux.cz

[53] DIETRICH, Olaf, José G. RAYA, Scott B. REEDER, Maximilian F. REISER a Stefan O. SCHOENBERG, 2007. Measurement of signal-to-noise ratios in MR images: Influence of multichannel coils, parallel imaging, and reconstruction filters. Journal of Magnetic Resonance Imaging. 2007(vol. 26), 375-385. ISSN 10531807. Dostupné z: doi:10.1002/jmri.20969

[54] Signal to Noise Ratio (SNR): Huygens software [online], 2023. Amsterdam: Scientific Volume Imaging [cit. 2023-05-10]. Dostupné z: https://svi.nl/Signal-to-Noise-Ratio

[55] GIAMMARCHI, 2019. Antimatter Quantum Interferometry. Symmetry. 2019(vol. 11), 1-8. ISSN 2073-8994. Dostupné z: doi:10.3390/sym11101247

[56] THUNG, Kim-Han a Paramesran RAVEENDRAN, 2009. A survey of image quality measures. 2009 International Conference for Technical Postgraduates (TECHPOS). IEEE, 2009, 2010(7), 1-4. ISBN 978-1-4244-5223-1. Dostupné z: doi:10.1109/TECHPOS.2009.5412098

[57] MITTAL, Anish, Anush Krishna MOORTHY a Alan Conrad BOVIK, 2012. No-Reference Image Quality Assessment in the Spatial Domain. IEEExplore. Austin, Texas, 2012(4695), 14. Dostupné z: doi:10.1109/TIP.2012.2214050

[58] CHOW, Li Sze a Heshalini RAJAGOPAL, 2017. Modified-BRISQUE as no reference image quality assessment for structural MR images. Magnetic Resonance Imaging. 2017(vol. 43), 74-87. ISSN 0730725X. Dostupné z: doi:10.1016/j.mri.2017.07.016

[59] PONOMARENKO N., V. Lukin, A. Zelensky, K. Egiazarian, M. Carli, and F. Battisti, "TID2008—a database for evaluation of full-reference visual quality assessment metrics," Adv. Modern Radioelectron., vol. 10, no. 10, pp. 30–45, 2009. Dostupné z https://www.researchgate.net/publication/221678002_TID2008_-_A_Database_for_Evaluation_of_Full-Reference

[60] BURDZIAKOWSKI, Pawel, 2020. Increasing the Geometrical and Interpretation Quality of Unmanned Aerial Vehicle Photogrammetry Products using Super-Resolution Algorithms. Remote Sensing: 2020. 2020(vol. 12), 1-20. ISSN 2072-4292. Dostupné z: doi:10.3390/rs12050810

[61] KUMAR, Jayant, Francine CHEN a David DOERMANN, 2012. Sharpness Estimation for Document and Scene Images [online]. ICPR, 2012, 4 [cit. 2021-5-14]. ISSN 978-4-9906441-1-6. Dostupné z: https://projet.liris.cnrs.fr/imagine/pub/proceedings/ICPR-2012/media/files/0043.pdf

[62] JAIN, Anil, Karthik NANDAKUMAR a Arun ROSS, 2005. Score normalization in multimodal biometric systems. Pattern Recognition. 2005(vol. 38), 2270-2285. ISSN 00313203. Dostupné z: doi:10.1016/j.patcog.2005.01.012

[63] CXRO: The Center for X-ray Optics [online], 2022. Berkeley: The Center for X-Ray Optics [cit. 2023-05-17]. Dostupné z: https://henke.lbl.gov/optical_constants/index.html

[64] X-Ray Optics Calculator: Refractive Index Decrement [online]. Chernogolovka: IMT RAS [cit. 2023-05-17]. Dostupné z: http://purple.iptm.ru/xcalc/xcalc_mysql/ref_index.php

[65] GOHLKE, Christoph, 2023. cgohlke/molmass: v2023.4.10 [online]. B.m.: Zenodo. Dostupné z: doi:10.5281/ZENODO.7135495

[66] THOMPSON, A., D. ATTWOOD, E. GULLIKSON, et al., 2009. X-RAY DATA BOOKLET. 3rd. ed. Berkeley: Center for X-ray Optics, Dostupné z: https://xdb.lbl.gov

[67] DŘEVO centrum: Dřevo centrum - komplexní informace o dřevě a jeho použití., 2007. DŘEVO centrum [online]. Prahy: Exaltor - grafika, webdesign, reklama [cit. 2023-05-20]. Dostupné z: https://drevo.celyden.cz/sloen-a-vlastnosti-deva/chemicke-slozeni-dreva/index.html

[68] ŠALPLACHTA, JAKUB a ZEMEK, MAREK, 2022. 2022. B.m.: Brno University of Technology. Dostupné z: doi:10.48700/DATST.SN1DN-TMM57

[69] Zing [online], 2022. Warsaw: ZING [cit. 2023-05-20]. Dostupné z: https://zing.com.pl/

[70] BANGARE, Sunil L., Amruta DUBAL, Pallavi S. BANGARE a S.T. PATIL, 2015. Reviewing Otsu's Method For Image Thresholding. International Journal of Applied Engineering Research. 2015(vol. 10), 21777-21783. ISSN 0973-4562. Dostupné z: doi:10.37622/IJAER/10.9.2015.21777-21783

[71] National Center for Biotechnology Information (2023). PubChem Compound Summary for CID 439213, D-Glucosamine. Retrieved May 21, 2023 Dostupné z: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/D-Glucosamine

Seznam použitých zkratek a symbolů

2D	dvojrozměrné
3D	trojrozměrné
a.u.	bezrozměrná jednotka
β	útlum rentgenového záření v komplexním indexu lomu
BG	pozadí vzorku
BRISQUE	bezreferenční paramert kvality obrazu
c	rychlost světla
C	kontrast
CCD	typ čipu (Charge-Coupled Device)
CEITEC	Středoevropský technologický institut
cm^3	centimetr krychlový
CMOS	typ čipu (Complementary Meta-Oxide-Semiconductor)
CT	výpočetní tomografie
CXRO	centrum rentgenové optiky
d	vzdálenost mřížky od zdroje
D	efektivní vzdálenost vzorku od detektoru
δ	fázový posun v komplexním indexu lomu
d_M	příčná velikost objektu
E	energie
E_b	vazební energie elektronu
E_{e^-}	energie valenčního elektronu
E_i	energie dopadajícího fotonu
E_k	kinetická energie fotoelektronu
E_{sc}	energie rozptýleného fotonu
f	objektová funkce obrazové domény
F	Fourierova transformace
F^{-1}	zpětná Fourierova transformace
f_1, f_2	atomové rozptylové koeficienty
FS	ohnisko na anodě (focal spot)
g	gram
g_0	perioda mřížky
g_τ	stupeň časové koherence
GUI	grafické uživatelské prostředí
h	Planckova konstanta
I	intenzita
$I_{\max}$	maximální intenzita

$I_{\min}$	minimální intenzita
I_{OBJ}	intenzita v oblasti vzorku
IR	infračervené záření
J	proudová hustota elektronů
k	Boltzmanova konstanta
keV	kiloelektronvolt
ξ	šířka kontrastního pásu
kV	kilovolt
l_c	koherenční délka
$L_\perp$	příčná koherenční délka
L_{shear}	difrakční délka
λ	vlnová délka
m	hmotnost elektronu
M	geometrické zvětšení
m	metr
M_a	molární hmotnost
mA	miliampér
MeV	megaelektronvolt
μ	útlum záření
μ_{compt}	útlum záření způsobený Comptonovým jevem
μ_{pe}	útlum záření způsobený fotoelektrickým jevem
μ_{ray}	útlum záření způsobený Rayleighovým rozptylem
mm	milimetr
MSR	střední kvadratická chyba
m_u	atomová hmotnostní jednotka
N	počet elektronů
n	index lomu
N_F	Fresnelovo číslo
N_a	Avogadrova konstanta
OBJ	oblast vzorku
ω	prostorová frekvence
$\|\omega\|$	filtr prostorových frekvencí
p	paralelní projekce
PE	polyester
ϕ	úhlová velikost
ϕ	změna fáze úměrná tloušťce objektu
PHRT	řezy s aplikací algoritmu *phase retrieval*
π	Ludolfovo číslo
PP	polypropylen

ψ	vlnová funkce
ψ^*	komplexně sdružená vlnová funkce
PSNR	špičkový poměr signálu k šumu
q	náboj elektronu
$\vec{r}$	polohový vektor
R_1	vzdálenost zdroje od vzorku
R_2	vzdálenost vzorku od detektoru
r_e	klasicý poloměr elektronu
ρ	hustota materiálu
ρ_e	elektronová hustota
RTG	rentgenové záření
s	sekunda
Sh	parametr ostrosti
σ_{compt}	průřez pro Comptonův rozptyl
σ_{BG}	směrodatná odchylka v oblasti pozadí
σ_p	rozmazání ostrých přechodů
σ_s	velikost stopy zdroje
SNR	poměr signálu k šumu
SR	prostorové rozlišení
SSIM	podobnost struktur
T	termodynamická teplota
t	čas
t	vzdálenost od osy rotace
τ_c	koherenční doba
θ	úhel paprsků vzhledem k ose x
U	prostorová frekvence podél osy x
$\|u\|$	prostorová frekvence struktur v objektu
μm	mikrometr
UV	ultrafialové záření
v	prostorová frekvence podél osy y
v_m	rychlost světla v prostředí
VUT	Vysoké učení technické v Brně
W	výstupní práce materiálu
x	tloušťka
$x_{\max}$	maximální hodnota parametru x
$x_{\min}$	minimální hodnota parametru x
x'	normalizovaný parametr x
Z	protonové číslo